WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

NGUYỄN ĐÌNH TRIỆU

EBOOKBKMT.COM

HỖ TRỢ TÀI LIỆU HỌC TẬP

CÁC PHƯƠNG PHÁP VẬT LÝ ỨNG DỤNG TRONG HÓA HỌC

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP.QUY NHƠN

ĐHQG Hà Nội

NHÀ XUẤT BẢN ĐẠI HỌC QUỐC GIA HÀ NỘI

NGUYỄN ĐÌNH TRIỆU

CÁC PHƯƠNG PHÁP VẬT LÝ ỨNG DỤNG TRONG HÓA HỌC

ĐHQG Hà Nội

https://tieulun.hopto.org

Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú

WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

NGUYỄN ĐÌNH TRIỆU

CÁC PHƯƠNG PHÁP VẬT LÝ ỨNG DỤNG TRONG HÓA HỌC

(In lần thứ 3)

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 10003 TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

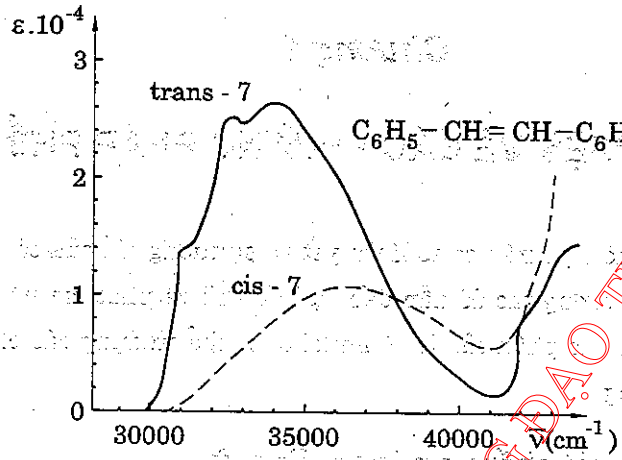
NHÀ XUẤT BẢN ĐẠI HỌC QUỐC GIA HÀ NỘI

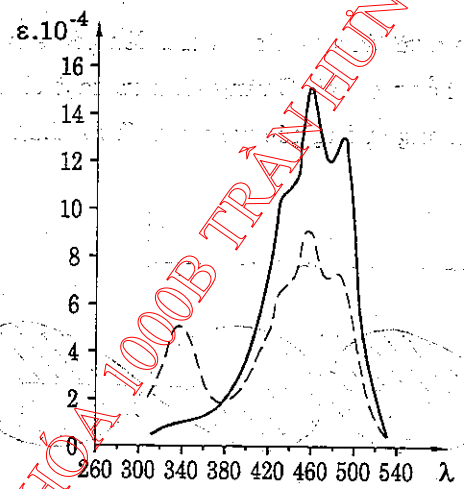
https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

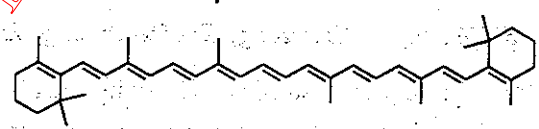
DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP.QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

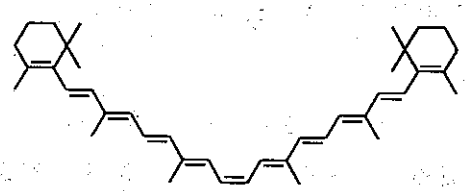




β – Carotin



all - trans



15 - cis

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

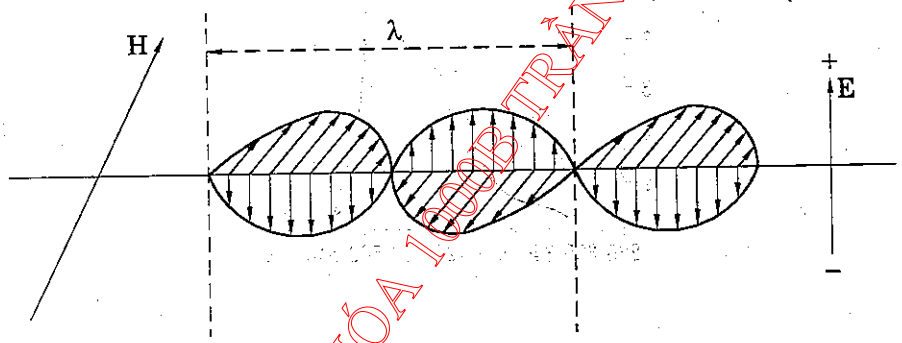
Chương 1

KHÁI NIỆM VỀ CÁC PHƯƠNG PHÁP PHỔ

Các phương pháp phổ dựa trên cơ sở lí thuyết về sự tương tác của các bức xạ điện từ đối với các phân tử. Quá trình tương tác đó dẫn đến sự hấp thụ và phát xạ năng lượng và có liên quan chặt chẽ đến cấu trúc của phân tử, do đó người ta có thể sử dụng các phương pháp phổ để xác định cấu trúc của chúng.

1.1. Sự tương tác giữa vật chất và bức xạ điện từ

Các bức xạ điện từ bao gồm từ tia γ và tia vũ trụ đến các sóng vô tuyến trong đó có bức xạ vùng tử ngoại, khả kiến và hồng ngoại. Chúng sinh ra một từ trường và một điện trường biến đổi cùng tần số nhưng có hướng vuông góc với nhau *(hình 1.1)*.



***Hình 1.1** Sóng điện từ, H: từ trường, E: điện trường, λ: bước sóng.*

Các bức xạ điện từ được coi như vừa là sóng chuyển động, vừa là một dòng của các phần tử nhỏ gọi là photon. Khi coi là sóng nó được đặc trưng bằng các đại lượng: bước sóng (λ), tốc độ truyền sóng (c), chu kì (T), tần số (ν) với $\nu = \frac{1}{T}$ là số dao động trong một giây. Các đại lượng đó liên quan với nhau qua biểu thức:

$\lambda\nu = c$, ở đây c là tốc độ ánh sáng.

Chu kì T là khoảng thời gian ngắn nhất thực hiện một dao động.

Khi coi là dòng các hạt photon thì các hạt này có năng lượng (E) được biểu diễn theo biểu thức:

$$E = h\nu$$

h là hằng số Planck, $h = 6{,}6262.10^{-34}$ J.s

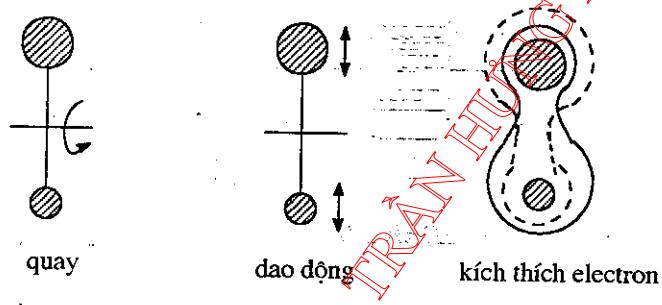
DIỄN ĐÀN LUYỆN THI HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP QUY NHƠN
https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

Khi bức xạ điện từ tương tác với các phân tử vật chất có thể xảy ra theo hai cách: trạng thái năng lượng của phân tử thay đổi hoặc không thay đổi. Khi có sự thay đổi năng lượng thì phân tử có thể hấp thụ hoặc bức xạ năng lượng. Nếu gọi trạng thái năng lượng ban đầu của các phân tử là E_1, sau khi tương tác là E_2 thì có thể viết:

$$\Delta E=E_2-E_1$$

$\Delta E>0$: phân tử hấp thụ năng lượng, $\Delta E<0$: phân tử bức xạ năng lượng.

Khi các phân tử hấp thụ năng lượng từ bên ngoài có thể dẫn đến các quá trình thay đổi trong phân tử (quay, dao động, kích thích electron phân tử...) hoặc trong nguyên tử (cộng hưởng spin electron, cộng hưởng từ hạt nhân) như hình 1.2.



***Hình 1.2** Các trạng thái kích thích phân tử.*

Mỗi một quá trình như vậy đều đòi hỏi một năng lượng nhất định đặc trưng cho nó, nghĩa là đòi hỏi bức xạ điện từ có một tần số hay chiều dài sóng nhất định để kích thích *(xem bảng 1.1)*.

Trong các bức xạ điện từ thì vùng phổ quang học có tần số 10^{12} đến 10^{15}Hz gồm bức xạ hồng ngoại, khả kiến và tử ngoại.

Đơn vị năng lượng: thường dùng eV, kcal/mol, kJ/mol.

1 eV=23 kcal/mol~96,5 kJ/mol

Đơn vị chiều dài sóng (λ): m, cm, μm(micromet), nm (nanomet), Å (angstrôm).

1cm =10^4 μm = 10^7nm = 10^8Å

Đơn vị tần số (ν): CPS , Hz (Hec), KHz (kilohec), MHz (megahec).

1 CPS (cycle per second) =1Hz (Hertz)

1MHz=10^3KHz=10^6Hz.

Số sóng $\bar{\nu}$ là số các sóng trong 1 cm:

$$\bar{\nu}=1/\lambda=\nu/c$$

Đơn vị số sóng luôn luôn dùng là cm^{-1}.

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 10CB TRẦN HƯNG ĐẠO TP QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

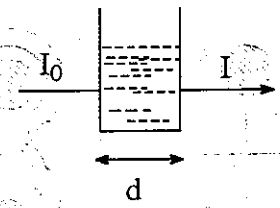
Dựa theo chiều dài bước sóng từ dài đến ngắn, các bức xạ điện từ được chia thành vùng khác nhau: sóng vô tuyến, sóng micro, hồng ngoại, nhìn thấy, tử ngoại, rơnghen, tia γ... (bảng 1.1). Chùm tia sáng không bị tán sắc sau khi đi qua lăng kính được gọi là ánh sáng đơn sắc. Mỗi ánh sáng đơn sắc có một màu nhất định gọi là màu đơn sắc.

1.2. Định luật Lambert-Beer

Khi chiếu một chùm tia sáng đơn sắc đi qua một môi trường vật chất thì cường độ của tia sáng ban đầu (I_0) sẽ bị giảm đi chỉ còn là I *(hình 1.3)*.

Tỉ số $I/I_0.100\%=T$ được gọi là độ truyền qua.

Tỉ số $(I_0-I)/I.100\%=A$ được gọi là độ hấp thụ.



Hình 1.3

Độ lớn của độ truyền qua (T) hay độ hấp thụ (A) phụ thuộc vào bản chất của chất, vào chiều dày d của lớp mỏng và vào nồng độ C của dung dịch. Có thể viết:

$$\lg(I_0/I_\lambda)=\varepsilon^\lambda Cd=D^\lambda$$

ở đây ε gọi là hệ số hấp thụ, C được tính bằng mol/l, d tính bằng cm, còn D gọi là mật độ quang. Cần chú ý là phương trình trên chỉ đúng với tia sáng đơn sắc.

Trong phân tích định lượng bằng phương pháp trắc quang người ta phải chọn một bước sóng λ nhất định, một chiều dày cuvet d nhất định và lập phương trình phụ thuộc của mật độ quang D vào nồng độ C:

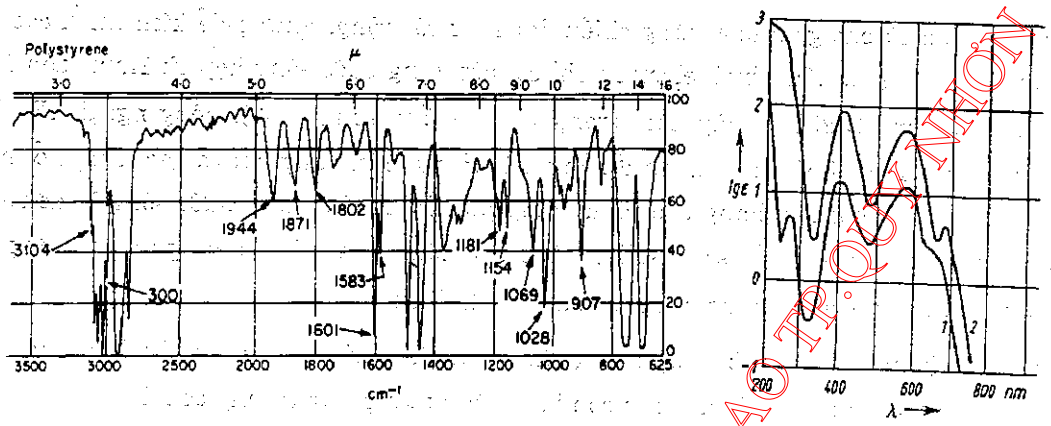
$$D_\lambda=f(C)$$

1.3. Đường cong hấp thụ và độ phân giải

Từ phương trình biểu diễn sự phụ thuộc của mật độ quang vào nồng độ dung dịch, chiều dày cuvet cũng như bản chất của chất, người ta còn thiết lập sự phụ thuộc của mật độ quang vào chiều dài bước sóng kích thích $D_\lambda=f(\lambda)$. Đường cong biểu diễn sự phụ thuộc này gọi là phổ. Các đỉnh hấp thụ cực đại gọi là dải hay đỉnh hấp thụ, chiều cao của các đỉnh hấp thụ gọi là cường độ *(hình 1.4)*.

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 10003 TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

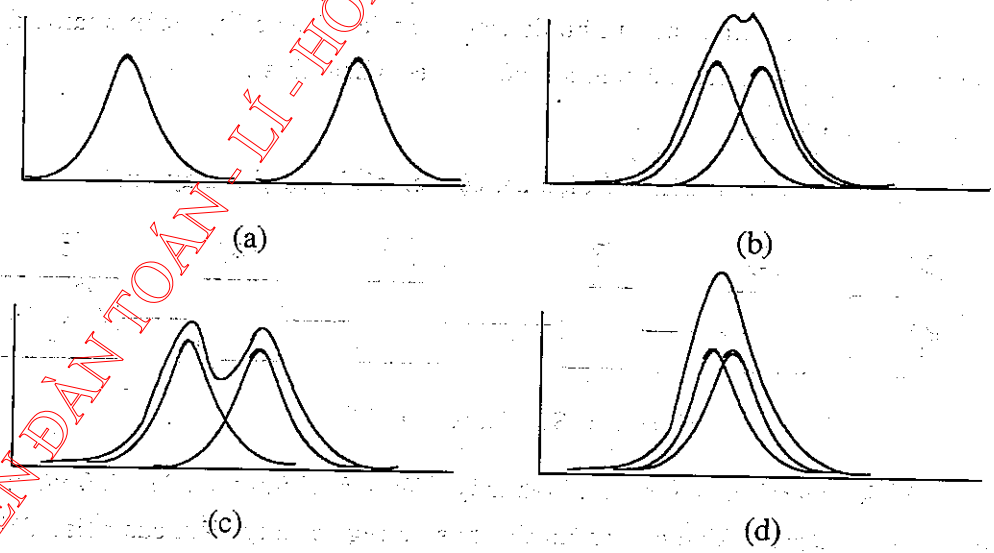
https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON



Hình 1.4 *Phổ hấp thụ a)hồng ngoại ;b)tử ngoại.*

Các đỉnh hấp thụ có khi được tách ra khỏi nhau hoàn toàn, nhưng có nhiều khi chúng chồng lên nhau một phần hay gần như hoàn toàn *(hình 1.5)*. Sự tách biệt này phụ thuộc vào khả năng tách biệt của từng máy mà được gọi là khả năng phân giải của máy. Người ta định nghĩa độ phân giải R của máy là khả năng tách biệt 2 đỉnh hấp thụ có chiều dài bước sóng λ và λ+Δλ:

$$R = \frac{\lambda}{\Delta\lambda}$$



Hình 1.5 *Hai đỉnh phổ a)tách hoàn toàn; b-d)chồng lên nhau.*

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

1.4. Vùng phổ quang học

Bức xạ điện từ bao gồm một vùng chiều dài sóng rất rộng, nhưng để kích thích các quá trình quay, dao động và kích thích electron chỉ có một vùng bước sóng hẹp từ 1mm đến 100Å hay 10^{-1} đến 10^{-6} cm. Giới hạn này nằm trong vùng phổ vi sóng (MW), hồng ngoại (IR), khả kiến (VIS) và tử ngoại (UV) như chỉ ra ở bảng 1.1. Hàng trên cùng chỉ ra các loại phổ, hàng thứ hai là các loại tương tác, hàng thứ ba là vùng phổ, hàng thứ tư là bước sóng λ (đơn vị Å, μm, nm), số sóng $\overline{\nu}$ (cm^{-1}) và tần số ν (MHz); hàng thứ năm là các giá trị năng lượng tương ứng (kcal/mol) và hàng cuối cùng là mô hình các dạng kích thích.

Nhìn vào bảng 1.1 thấy rõ năng lượng cần thiết cho quá trình quay nhỏ hơn quá trình dao động và quá trình kích thích electron còn bước sóng tương ứng thì ngược lại.

1.5. Sơ đồ khối của phổ kế quang học

Sơ đồ khối của phổ kế quang học gồm các bộ phận chính sau *(hình 1.6)*:

(1) *Nguồn sáng,* tùy thuộc vào mỗi loại phổ kế mà có các nguồn sáng riêng, ví dụ phổ kế hồng ngoại dùng nguồn phát bức xạ hồng ngoại (đèn Globa, đèn Nernst, đèn Nicrom), phổ kế tử ngoại dùng nguồn phát bức xạ tử ngoại (đèn hidro hoặc đèn đơteri), phổ kế khả kiến dùng đèn Tungsten, phổ kế Raman dùng nguồn laze.

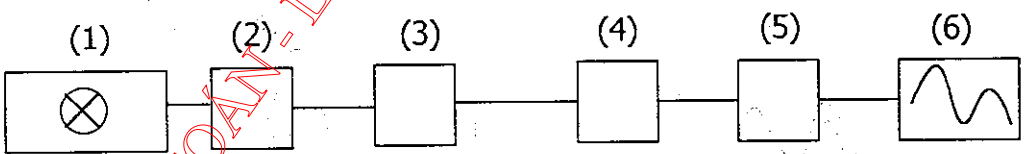
(2) *Cuvet mẫu.*

(3) *Bộ chọn sóng* có thể dùng kính lọc hay bộ đơn sắc (với lăng kính hay cách tử) để tách bức xạ đa sắc thành bức xạ đơn sắc.

(4) *Đêtectơ,* bộ phận phát hiện tín hiệu, biến tín hiệu quang thành tín hiệu điện. Có nhiều loại đêtectơ khác nhau như đêtectơ Vonteic, đêtectơ ống nhân quang, đêtectơ chuyển điện tích, đêtectơ cặp nhiệt điện, đêtectơ hỏa nhiệt.

(5) *Khuếch đại tín hiệu.*

(6) *Bộ phận đọc tín hiệu* (đồng hồ điện kế, bộ hiện số, bộ tự ghi, máy tính).

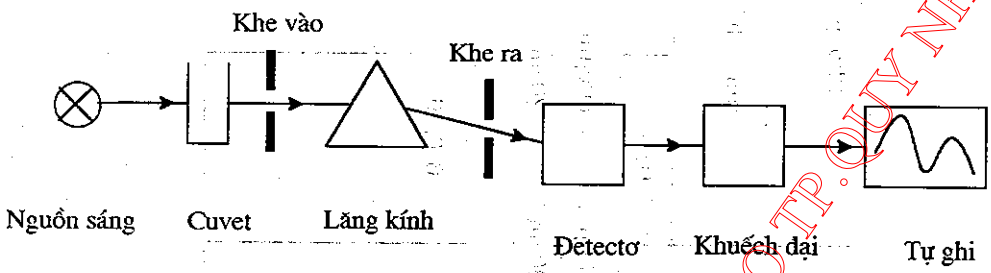


Hình 1.6 *Sơ đồ khối phổ kế.*

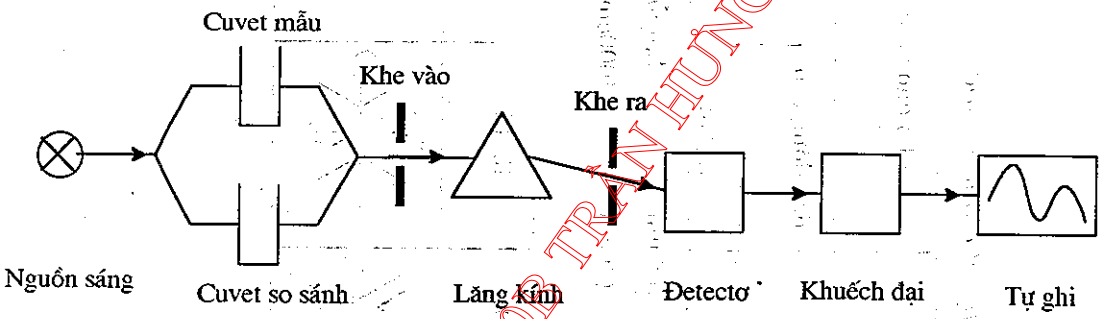
Về mặt thiết kế, người ta chế tạo hai kiểu máy: kiểu một chùm tia *(hình 1.7)* và kiểu hai chùm tia *(hình 1.8)*. Trước kia kiểu một chùm tia chỉ sử dụng đo từng điểm của chiều dài sóng, dùng cho phân tích định lượng, còn kiểu hai chùm tia có thể quét đồng thời cả một vùng chiều dài sóng liên tục, ví dụ từ 200 đến 1000 nm (phổ kế tử ngoại và khả kiến), từ 2,5 đến 25 μm,

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON
DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP.QUY NHƠN

tức 4000 cm^{-1} đến 400 cm^{-1} (phổ kế hồng ngoại). Ngày nay do việc sử dụng máy tính để lưu trữ và đọc tín hiệu cho nên các máy một chùm tia đã được thiết kế cho cả một phổ liên tục như máy hai chùm tia.

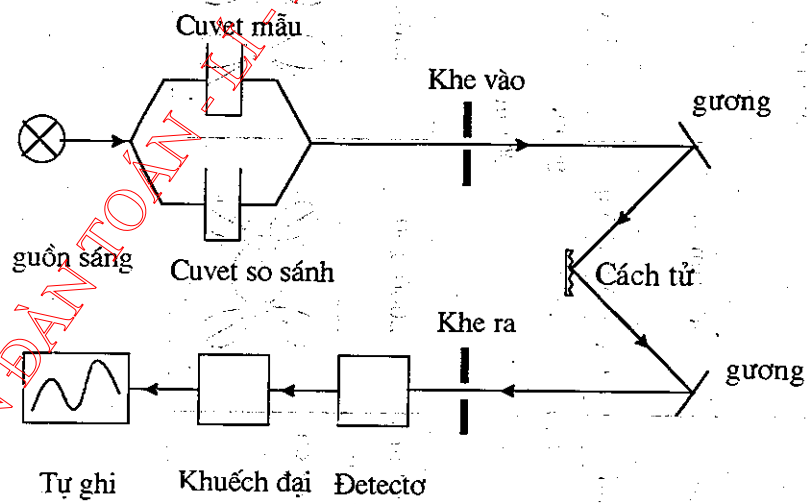


Hình 1.7 Sơ đồ phổ kế một chùm tia dùng lăng kính.



Hình 1.8 Sơ đồ phổ kế hai chùm tia dùng lăng kính.

Các phổ kế quang học hiện nay phổ biến sử dụng bộ đơn sắc bằng cách tử, sơ đồ quang đi theo hình 1.9 dưới đây:



Hình 1.9 Sơ đồ phổ kế hai chùm tia dùng cách tử.

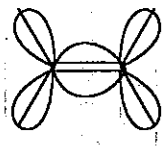
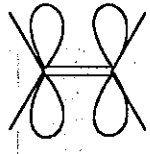
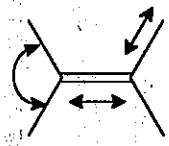
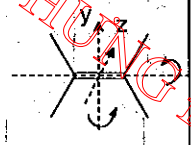
DIỄN ĐÀN TOÁN - HÓA 10003 TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org

Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 100B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

Bảng 1.1 *Vùng phổ quang học.*

Phổ	Phổ electron			Phổ dao động quay		Phổ quay	
Tương tác	electron σ	electron π,n		dao động cao	dao động phân tử	quay phân tử	
Vùng phổ	UV chân không	UV	VIS	IR gần	IR	IR xa	VI Sóng
100 Å / 200nm	2000Å	400nm	0,8 μm / 800 nm	2,5 μm / 4000cm^{-1}	50μm / 200cm^{-1}	500μm / 20cm^{-1}	1mm / 10cm^{-1} / 3.10^{6}MHz	
Năng lượng bức xạ (kcal/mol)	2000-150	150-80	80-40	40-15	15-0,6	0,6-0,06	0,06-0,03	
Dạng kích thích							

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON
https://tieulun.hopto.org

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Chương 2

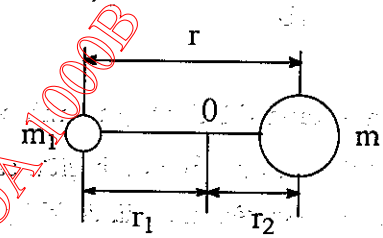
PHƯƠNG PHÁP PHỔ QUAY, PHỔ HỒNG NGOẠI VÀ RAMAN

Khi các phân tử hấp thụ năng lượng từ bên ngoài có thể dẫn đến quá trình quay, dao động xung quanh vị trí cân bằng của nó. Tùy theo năng lượng kích thích lớn hay nhỏ có thể xảy ra quá trình quay, dao động hay cả quay lẫn dao động đồng thời. Để kích thích các quá trình trên có thể sử dụng tia sáng vùng hồng ngoại (phổ hồng ngoại) hoặc tia khuếch tán Raman (phổ Raman). Phổ hồng ngoại viết tắt là IR (Infrared).

2.1. Cơ sở lí thuyết

2.1.1. Sự xuất hiện của quang phổ quay.

Đối với các phân tử gồm hai nguyên tử có khối lượng khác nhau (như CO, HCl) có $\mu \neq 0$ có thể xếp vào mẫu quay của hai quả tạ có khối lượng m_1 và m_2. Giả thiết là trong quá trình quay thì khoảng cách giữa hai nguyên tử không thay đổi. Một mẫu như vậy được gọi là mẫu hai quả tạ hay rotato vững chắc *(hình 2.1)*.



***Hình 2.1** Mẫu rotato vững chắc.*

Khi phân tử gồm hai nguyên tử quay theo một hướng trong không gian thì momen quán tính I của quá trình được tính theo biểu thức:

$$I = mr_0^2 \qquad (2.1)$$

trong đó: $r_0 = r_1 + r_2$

$$M = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$$

Theo cơ học lượng tử thì năng lượng quay E_q của các phân tử gồm hai nguyên tử được tính theo phương trình:

$$E_q = \frac{h^2}{8\pi^2 I} J(J+1) = E_j \qquad (2.2)$$

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

trong đó I là momen quán tính, h là hằng số Planck, J là số lượng tử quay và J=0,1,2,3,...

Chia hai vế của phương trình (2.2) cho *hc* được:

$$F_J = \frac{E_J}{hc} = \frac{h}{8\pi^2 Ic} J(J+1) \qquad (2.3)$$

Đặt $B = \frac{h}{8\pi^2 Ic}$ thì phương trình trên có dạng:

$$F_J = BJ(J+1) \qquad (2.4)$$

B được gọi là số lượng tử quay và F_J là số hạng quay.

Bước chuyển dời năng lượng trong quá trình quay của phân tử gồm hai nguyên tử tuân theo qui tắc $\Delta J = \pm 1$ do đó:

$$\bar{\nu}_q = \frac{E_{J'}}{hc} - \frac{E_J}{hc} = BJ'(J'+1) - BJ(J+1)$$

$$\bar{\nu}_q = 2B(J+1) \qquad (2.5)$$

Khi J thay đổi thì F_J/hc và $\bar{\nu}_q$ thay đổi theo:

J	0	1	2	3	4
F_J/hc	0	2B	6B	12B	20B
$\bar{\nu}_q$	2B	4B	6B	8B	10B

Từ bảng trên thấy rõ khi J tăng thì F_J tăng nhanh còn $\bar{\nu}_q$ tăng lần lượt mỗi đoạn 2B. Tuy nhiên đối với các phân tử thực thì khoảng cách giữa các đỉnh hấp thụ không bằng nhau nghĩa là không phải đều bằng 2B. Nguyên nhân là do khi phân tử quay thì khoảng cách giữa các phân tử cũng thay đổi. Bởi vậy đối với các phân tử thực thì phương trình số sóng của phân tử quay phải tính theo:

$$\bar{\nu}_q = 2B(J+1) - 4D(J+1)^3$$

trong đó D là năng lượng phân li của phân tử. Hình 2.2 chỉ ra sơ đồ số hạng quay (a) và phổ quay của phân tử $H^{35}Cl$ (b).

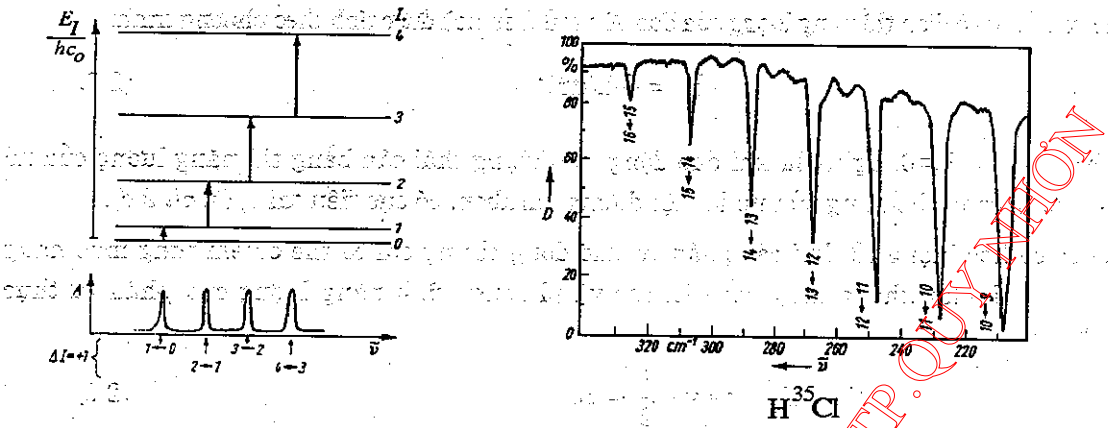
Bảng 2.1 *Giá trị hằng số quay B của một số phân tử.*

Phân tử	B, cm^{-1}	Phân tử	B, cm^{-1}
H_2	60,8	O_2	1,45
HF	20,91	Cl_2	0,244
LiH	4,23	Br_2	0,081
CO	1,93	I_2	0,037

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 10CB TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM



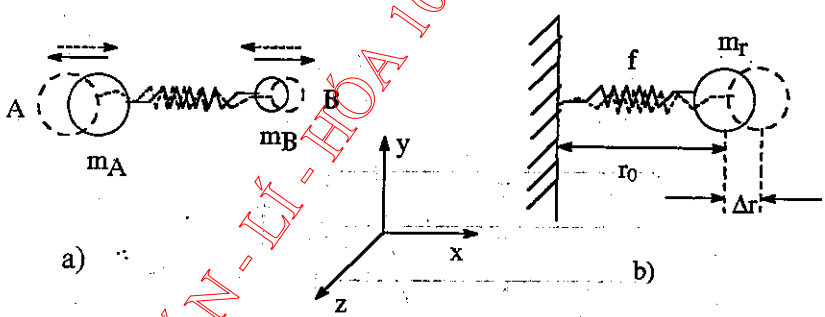
(a) (b)

Hình 2.2 *Sơ đồ biểu diễn số hạng quay và phổ của phân tử gồm hai nguyên tử.*

Để kích thích phân tử quay, người ta thường dùng nguồn vi sóng cho nên phổ này được gọi là phổ vi sóng hoặc dùng tia sáng vùng hồng ngoại xa cho nên người ta còn gọi quang phổ quay là quang phổ hồng ngoại xa.

2.1.2. Sự xuất hiện của quang phổ dao động

Đối với các phân tử gồm hai nguyên tử người ta đưa vào mẫu hai hòn bi nối với nhau bởi một chiếc lò xo. Khoảng cách bình thường giữa hai hòn bi đó là r_o, nếu giữ chặt một hòn bi và kéo hòn bi kia ra một đoạn *dr* rồi thả tự do thì nó sẽ dao động quanh vị trí cân bằng với biên độ *dr* không đổi. Mẫu này được gọi là dao động tử điều hòa *(xem hình 2.3)*.



Hình 2.3 *Sơ đồ mẫu phân tử gồm hai nguyên tử dao động.*

Theo cơ học cổ điển thì tần số dao động điều hoà được tính theo phương trình:

$$\nu = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{k}{M}} \qquad (2.6)$$

ở đây k là hằng số lực, M là khối lượng rút gọn.

Như vậy tần số dao động phụ thuộc vào hằng số lực của liên kết giữa các nguyên tử và phụ thuộc vào khối lượng của các nguyên tử trong phân tử.

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 10005 TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Theo cơ học cổ điển thì năng lượng của dao động tử điều hoà được tính theo phương trình:

$$E_t = \frac{1}{2}k(dr)^2 \qquad (2.7)$$

do đó khi dr=0 thì E_t=0, nghĩa là khi dao động tử ở trạng thái cân bằng thì năng lượng của nó bằng 0. Đường cong thế năng của nó là một đường parabon, có cực tiểu tại r_o (*hình 2.4*).

Theo cơ học lượng tử, khi các phân tử dao động chúng chỉ có thể chiếm từng mức năng lượng nhất định chứ không thay đổi liên tục và phương trình năng lượng của phân tử thực được tính theo:

$$E_t = h\nu(v + \frac{1}{2}) = E_v \qquad (2.8)$$

v=0,1,2,... được gọi là số lượng tử dao động.

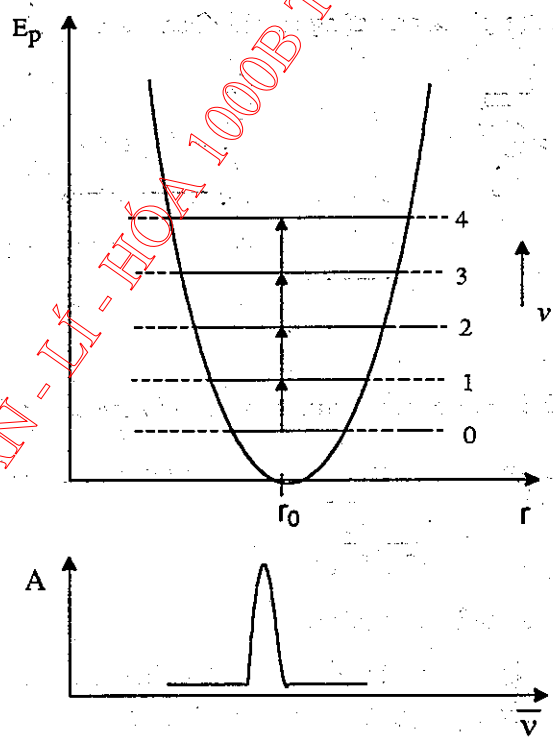
Khi v=0 thì $E_{v=0} \neq 0$, như vậy khi phân tử không dao động nó vẫn chứa một năng lượng nhất định gọi là năng lượng điểm không.

Vì phân tử thực không phải là dao động điều hòa nên phương trình năng lượng của nó phải được bổ chính theo công thức:

$$E_v = h\nu\left(v + \frac{1}{2}\right) - \frac{h^2\nu^2}{4D}\left(v + \frac{1}{2}\right)^2 \qquad (2.9)$$

ở đây D là năng lượng phân li của phân tử.

Đường cong thế năng của dao động không điều hòa không phải là một đường parabon như dao động điều hòa *(xem hình 2.5)*.



***Hình 2.4** Đường cong thế năng và phổ dao động của dao động tử điều hòa đơn giản.*

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

***Bảng 2.2** Tần số dao động cơ bản và dao động cao của HCl và CO (giá trị thực nghiệm).*

Bước chuyển		HCl	CO
v	v'	$\nu(cm^{-1})$	$\nu(cm^{-1})$
0	1	2885	2143
0	2	5668	4220
0	3	8347	6350

Qui tắc lựa chọn đối với phân tử dao động $\Delta v = \pm 1, \pm 2, ...$ Như vậy khi phân tử dao động có thể tiếp nhận các bước chuyển năng lượng sau:

v=0→v=1 gọi là dao động cơ bản

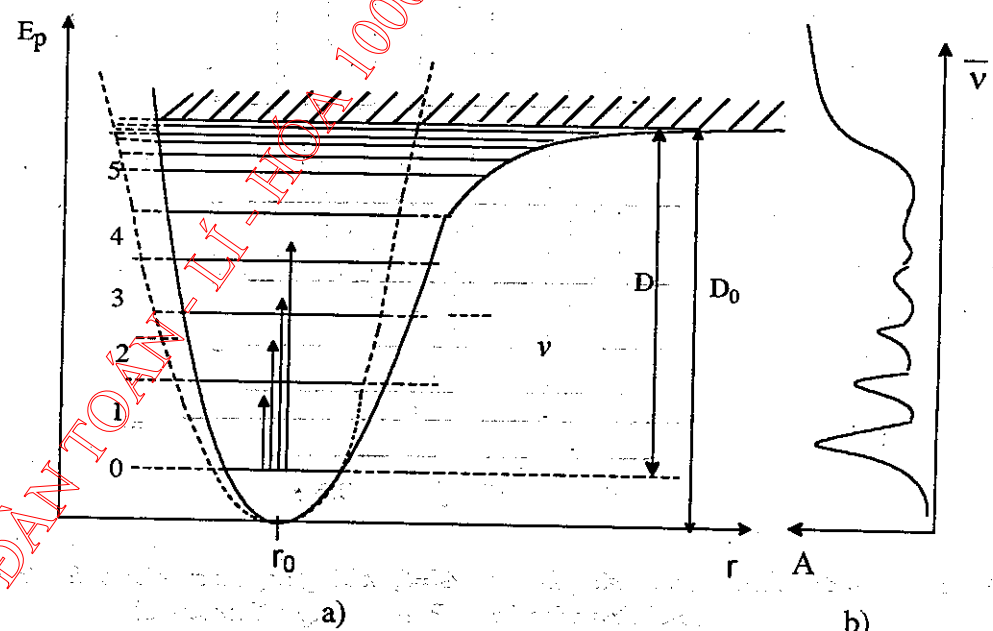
v=0→v=2 gọi là dao động cao mức 1

v=0→v=3 gọi là dao động cao mức 2

v=0→v=4 gọi là dao động cao mức 3

.. ..

v=0→v=n gọi là dao động cao mức n-1



***Hình 2.5** Đường cong thế năng (a) và phổ dao động (b) của dao động tử không điều hòa*

Tuy nhiên xác suất của các bước chuyển này (cường độ vạch phổ) giảm dần khi bậc dao động tăng *(xem hình 2.6 và bảng 2.2)*.

DIỄN ĐÀN TOÁN LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

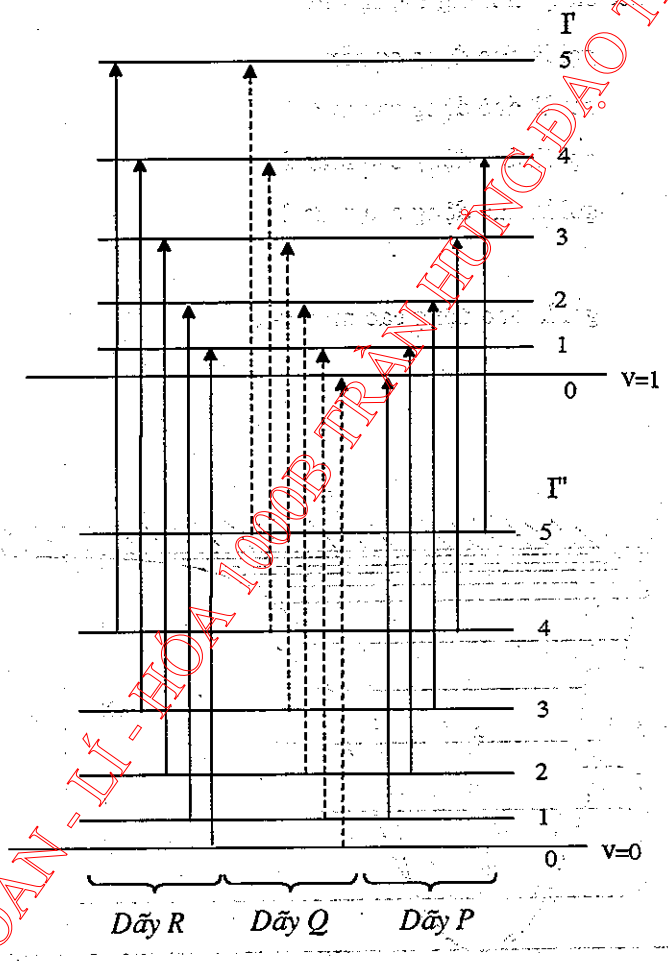
WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Khi kích thích năng lượng thích hợp thường xảy ra quá trình phân tử vừa quay vừa dao động gọi là dao động quay của phân tử. Năng lượng dao động quay bằng tổng năng lượng quay và năng lượng dao động:

$$E_{dq} = E_q + E_d = (v + 1/2)h\nu + Bhc\, J(J+1) \qquad (2.10)$$

Đối với phân tử dao động quay phải tuân theo qui tắc lựa chọn $\Delta J = \pm 1$ và $\Delta v = \pm 1, \pm 2, \pm 3, \ldots$

Theo qui tắc lựa chọn trên, phổ dao động quay của các phân tử gồm hai nguyên tử có hai nhánh P và R. Điểm Q ứng với bước nhảy J=0 và v=1 không xảy ra sự kích thích *(xem hình 2.6)*. Ví dụ phân tử CO cho phổ có hai nhánh như chỉ ra trên hình 2.7.

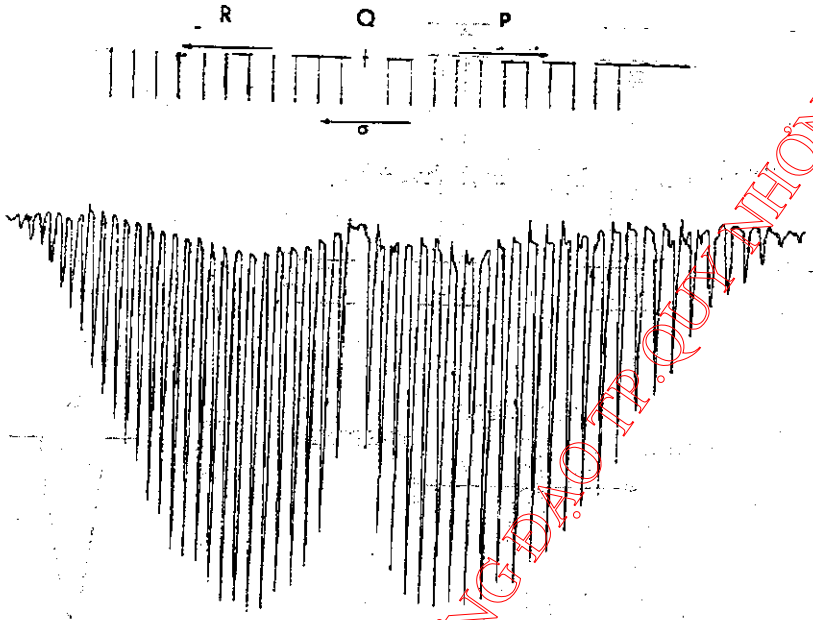


Hình 2.6 Sơ đồ số hạng quay của phân tử. ΔJ=0,: không xảy ra sự kích thích (điểm Q), ΔJ<0 ứng với nhánh P, ΔJ>0 ứng với nhánh R.

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 10000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM



Hình 2.7 Phổ dao động quay của khí CO.

2.1.4. Hiệu ứng Raman

Khi chiếu một chùm tia sáng vào một dung dịch keo rồi quan sát theo hướng thẳng góc với tia chiếu ban đầu người ta có thể nhận thấy chùm tia tán xạ (hiệu ứng Tyndall).

Tương tự, khi thay dung dịch keo bằng một dung dịch thật, tức là một dung dịch đồng nhất, bằng các dụng cụ quang học người ta cũng nhận thấy được các tia tán xạ theo hướng thẳng góc với tia ban đầu có tần số ν_0 bằng tần số của tia kích thích (tia Rayleigh), ngoài ra còn nhận được các tia có tần số nhỏ hơn $\nu_0-\nu_d$ (vạch Stoke) và lớn hơn $\nu_0+\nu_d$ (vạch anti-Stoke) có cường độ yếu hơn vạch ν_0.

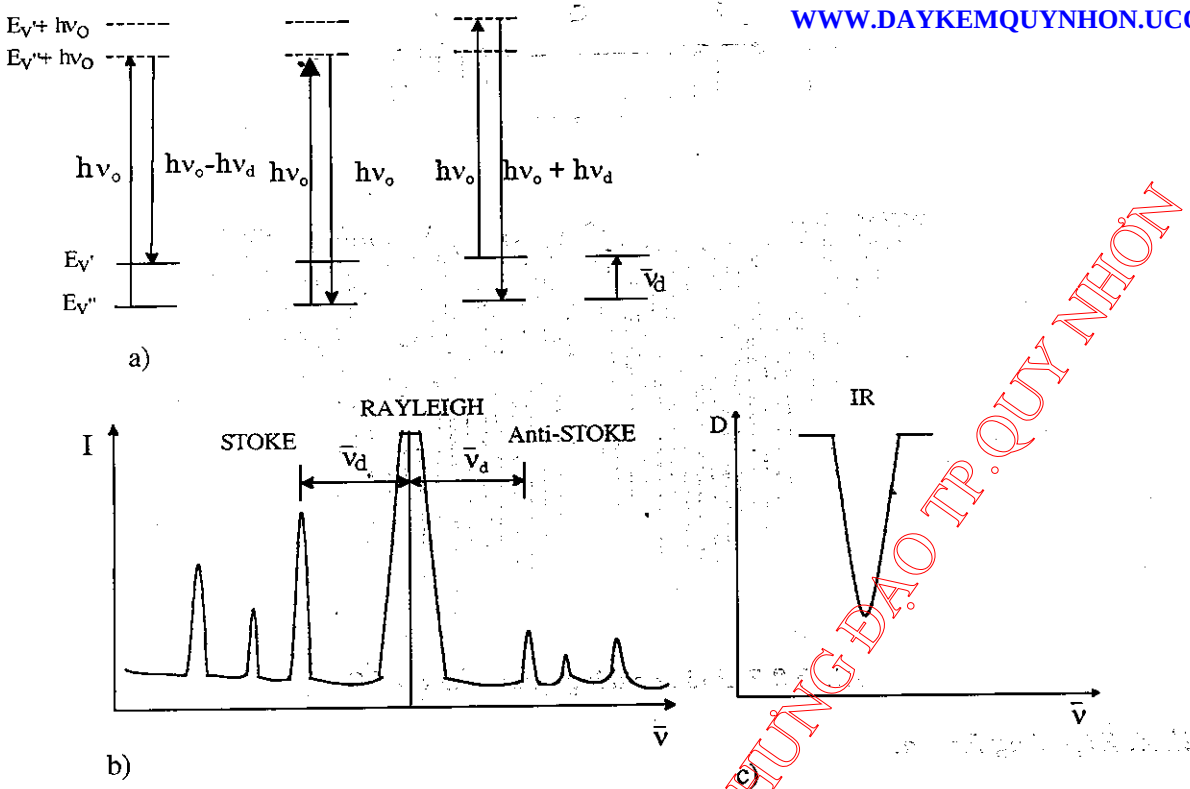
Các tia tán xạ có tần số $\nu_0\pm\nu_d$ được gọi là tia tán xạ Raman. Nguyên nhân xuất hiện tia Raman là do tương tác của các tia sáng kích thích với các phân tử làm biến dạng tuần hoàn lớp vỏ electron của các nguyên tử trong phân tử và dẫn đến làm dao động các hạt nhân nguyên tử với tần số ν_0. Năng lượng của các tia Raman bằng hiệu hay tổng năng lượng của các tia kích thích ban đầu và năng lượng dao động:

$$E_{Raman} = E_0 \pm E_d = h(\nu_0 \pm \nu_d) \qquad (2.11)$$

DIỄN ĐÀN TOÁN-LÝ-HÓA 10 CB TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM



Hình 2.8 Sơ đồ bước chuyển năng lượng của tia tán xạ (a); phổ Raman (b); phổ hồng ngoại (c).

Theo quan điểm lượng tử, các vạch Stoke và anti-Stoke xuất hiện là do phân tử đã hấp thụ và bức xạ năng lượng $h\nu_d$ như sơ đồ trên (*hình 2.8*).

2.1.5. Dao động chuẩn của phân tử.

Các nguyên tử trong phân tử dao động theo ba hướng trong không gian gọi là dao động chuẩn của phân tử.

Số dao động chuẩn trong phân tử có N nguyên tử tối đa bằng 3N-5 (đối với phân tử thẳng như CO_2) và 3N-6 (đối với phân tử không thẳng như H_2O). Mỗi dao động chuẩn có một mức năng lượng nhất định, tuy nhiên có trường hợp 2, 3 dao động chuẩn có cùng một mức năng lượng. Các dao động chuẩn nào có cùng một mức năng lượng gọi là dao động thoái biến.

Người ta phân biệt các dao động chuẩn thành hai loại:

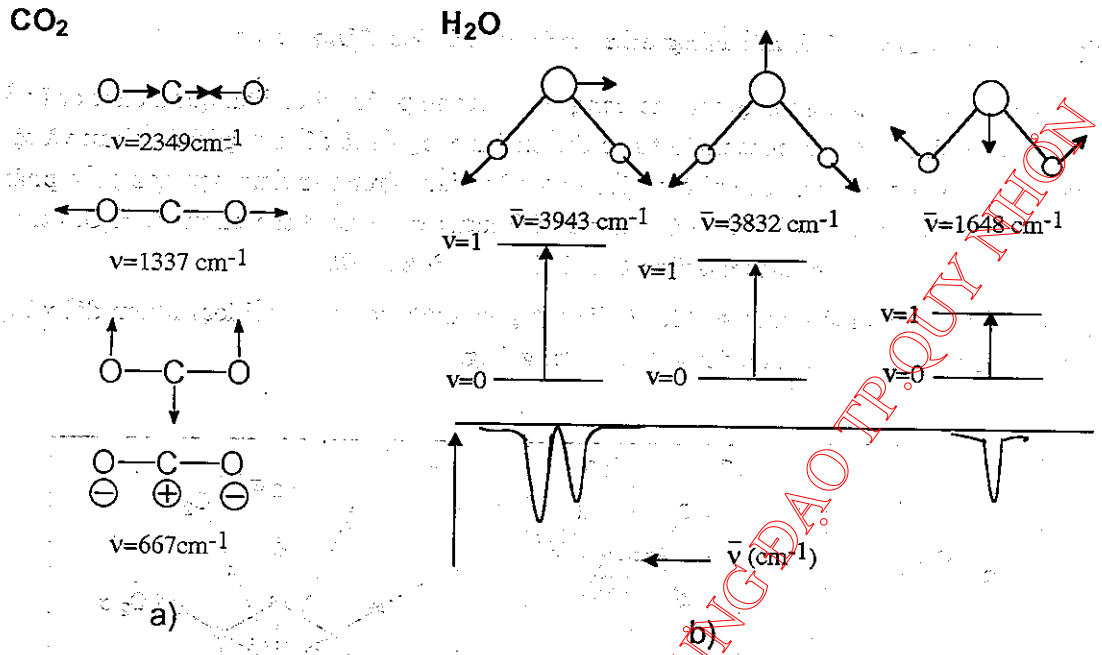
1) Dao động hoá trị *(kí hiệu là ν)* là những dao động làm thay đổi chiều dài liên kết của các nguyên tử trong phân tử nhưng không làm thay đổi góc liên kết.

2) Dao động biến dạng *(kí hiệu là δ)* là những dao động làm thay đổi góc liên kết nhưng không làm thay đổi chiều dài liên kết của các nguyên tử trong phân tử.

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÝ - HÓA 10001 TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM



Hình 2.9 Dao động riêng của phân tử CO_2 (a) và H_2O (b).

Mỗi loại dao động còn được phân chia thành dao động đối xứng *(kí hiệu là ν_s và δ_s)* và bất đối xứng *(kí hiệu là ν_{as} và δ_{as})*. Ví dụ, phân tử CO_2 và H_2O gồm 3 nguyên tử có thể có các dao động riêng *(xem hình 2.9)*. Phân tử CO_2 thẳng có 3N-5 = 3.3-5 = 4 dao động chuẩn, trong đó có 1 dao động hoá trị đối xứng (ν_s), 1 dao động hoá trị bất đối xứng (ν_{as}) và 2 dao động biến dạng đối xứng (δ_s). Hai dao động biến dạng này có cùng một mức năng lượng bởi vì hai dao động này hoàn toàn giống nhau *(xem hình 2.9a)*. Phân tử nước không thẳng sẽ có 3.3-6=3 dao động chuẩn, gồm hai dao động hoá trị (ν_s và ν_{as}) và một dao động biến dạng đối xứng (δ_s) với các mức năng lượng khác nhau *(xem hình 2.9b)*.

Điều kiện kích thích dao động:

1-Các dao động chỉ bị kích thích bởi bức xạ hồng ngoại nếu trong quá trình dao động momen lưỡng cực của phân tử bị biến đổi còn độ phân cực của phân tử không đổi:

$$\frac{\partial \mu}{\partial r} \neq 0 \text{ và } \frac{\partial \alpha}{\partial r} = 0$$

2- Các dao động chỉ bị kích thích bởi bức xạ Raman nếu trong quá trình dao động độ phân cực của phân tử bị biến đổi còn momen lưỡng cực của phân tử không thay đổi:

$$\frac{\partial \mu}{\partial r} = 0 \text{ và } \frac{\partial \alpha}{\partial r} \neq 0$$

Các phổ kế dùng bức xạ hồng ngoại kích thích được gọi là phổ kế hồng ngoại và phổ ghi được gọi là phổ hồng ngoại.

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP.QUY NHƠN

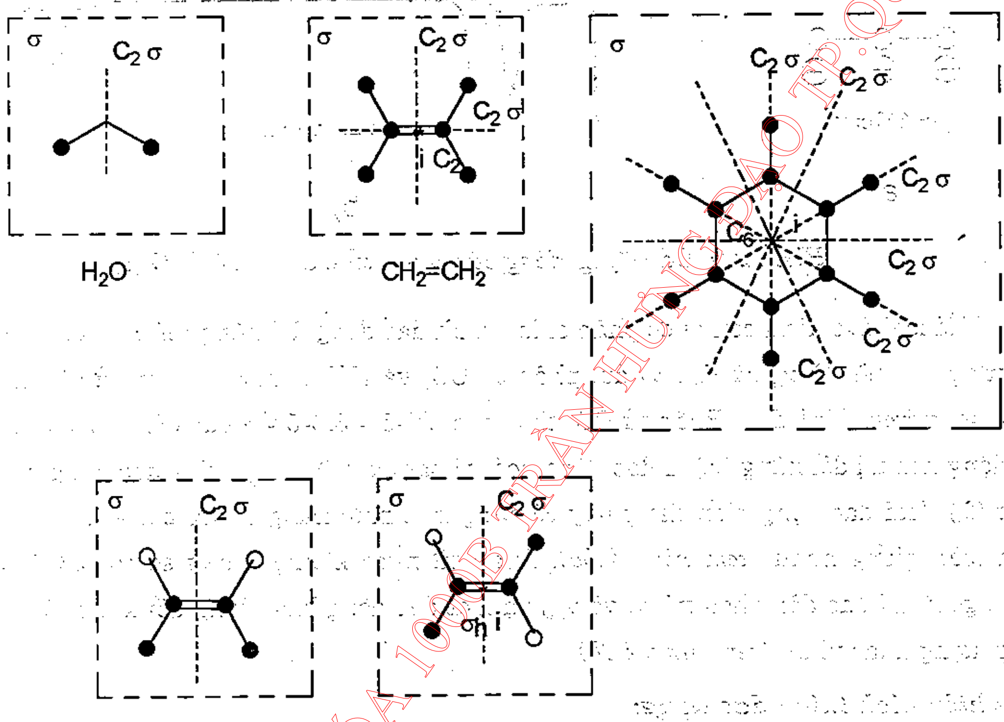
https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

2.1.6. Sự liên quan giữa tính đối xứng của phân tử và dao động chuẩn

Đặc trưng của phổ hồng ngoại và dao động chuẩn trong phân tử có liên quan chặt chẽ với tính đối xứng của phân tử. Mỗi một phân tử có thể chiếm các yếu tố đối xứng khác nhau và tập hợp các yếu tố đối xứng này cho các nhóm đối xứng tiêu biểu. Trong trường hợp đơn giản phân tử chứa tâm đối xứng i, trục đối xứng C_n và mặt đối xứng σ, ví dụ ở các phân tử H_2O, etilen C_2H_4, benzen C_6H_6, *cis*- và *trans*-đicloetilen ClCH=CHCl *(hình 2.10)*.

Mỗi phân tử trên chiếm một số yếu tố đối xứng và được xếp vào mỗi loại nhóm đối xứng khác nhau, đồng thời có một số dao động chuẩn tương ứng.



Hình 2.10 Các yếu tố đối xứng của H_2O (a), etilen C_2H_4 (b), benzen C_6H_6 (c), cis- (d) và trans-đicloetilen ClCH=CHCl (e).

Các dao động riêng này có thể hoạt động trong phổ hồng ngoại hoặc phổ Raman. Về mặt lí thuyết, các phân tử có tâm đối xứng thì các dao động hoạt động trong phổ hồng ngoại sẽ bị cấm trong phổ Raman và ngược lại, còn các phân tử không chứa tâm đối xứng thì các dao động có thể vừa hoạt động trong phổ hồng ngoại vừa hoạt động trong phổ Raman. Ví dụ phân tử *trans*-đicloetilen ClCH=CHCl chứa tâm đối xứng i có 12 dao động thì 6 dao động hoạt động trong phổ hồng ngoại còn 6 dao động kia hoạt động trong phổ Raman. Trái lại ở phân tử *cis*-đicloetilen ClCH=CHCl cả 12 dao động đều hoạt động trong phổ Raman, trong đó 10 dao động hoạt động trong phổ hồng ngoại.

Bảng 2.3 chỉ ra mối liên quan giữa tính đối xứng, dao động riêng và mức độ hoạt động trong phổ hồng ngoại (IR) và phổ Raman. Trên bảng ghi các kí hiệu sau:

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

- Các chữ A, g và số 1 chỉ ra tính đối xứng của dao động, còn các chữ B, u và số 2 chỉ ra tính bất đối xứng của dao động đối với một yếu tố đối xứng.
- Dấu + và dấu - chỉ ra hoạt động (+) hay bị cấm (-)

Chữ p là phân cực và dp là không phân cực của tín hiệu hấp thụ trong phổ Raman.

***Bảng 2.3** Tính đối xứng và dao động riêng của một số phân tử.*

Nhóm đối xứng, yếu tố đối xứng	Loại dao động	IR	Raman	Ví dụ
C_{2h} $1C_2, 1\sigma_h, i$	A_g	-	p+	*trans*-CHCl=CHCl
	A_u	+	-	
	B_g	-	dp	
	B_u	+	-	
C_{2v} $1C_2, 2\sigma_v$	A_1	+	p	H_2O *cis*-CHCl=CHCl
	A_2	-	dp	
	B_1	+	dp	
	B_2	+	dp	
D_{2h} $3C_2, 3\sigma_v, i$	A_g	-	p	C_2H_4
	A_u	-	-	
	B_{1g}	-	dp	
	B_{1u}	+	-	
	B_{2g}	-	dp	
	B_{2u}	+	-	
	B_{3g}	-	dp	
	B_{3u}	+	-	
D_{6h} $1C_6, 6C_2, 1\sigma_h, 6\sigma_v, i$	A_{1g}	-	p	C_6H_6
	A_{1u}	-	-	
	A_{2g}	-	-	
	A_{2u}	-	-	
	B_{1g}	+	-	
	B_{1u}	-	-	
	B_{2g}	-	-	
	B_{2u}	-	-	
	E_{1g}	-	dp	
	E_{1u}	+	-	
	E_{2g}	-	p+	
	E_{2u}	-	-	

2.2. Sơ đồ cấu tạo máy và kĩ thuật ghi phổ

2.2.1. Phổ kế hồng ngoại

Phổ kế hồng ngoại hiện nay gồm các loại: phổ kế hồng ngoại một chùm tia dùng kính lọc, phổ kế hồng ngoại hai chùm tia tán sắc và phổ kế hồng ngoại biến đổi Fourier (FT-IR).

Phổ kế hồng ngoại một chùm tia dùng kính lọc là loại đơn giản dùng cho phân tích định lượng khí. Sơ đồ của máy chỉ ra ở hình 2.11. Trong máy có hệ thống quang học và một bơm để hút mẫu khí dùng nguồn pin.

Phổ kế hồng ngoại hai chùm tia tán sắc là loại dùng phổ biến trước đây, máy ghi phổ quét cả vùng từ 4000 cm^{-1} đến 200 cm^{-1} có nối với bộ tự ghi hay máy vi tính.

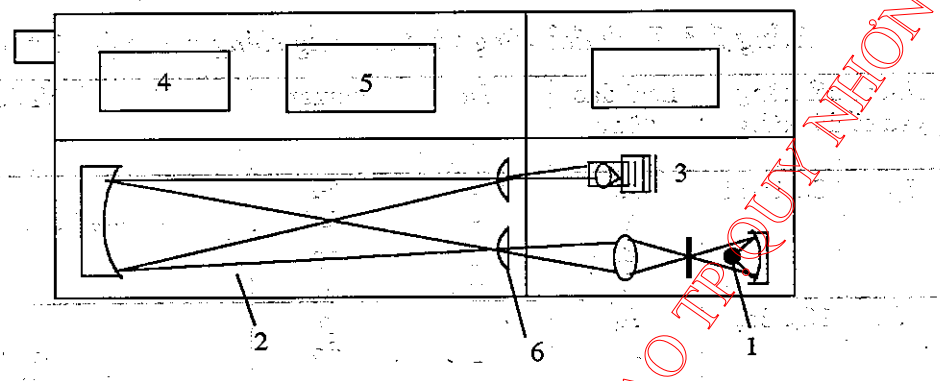
ĐỀ ĐOÁN TOÁN LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org

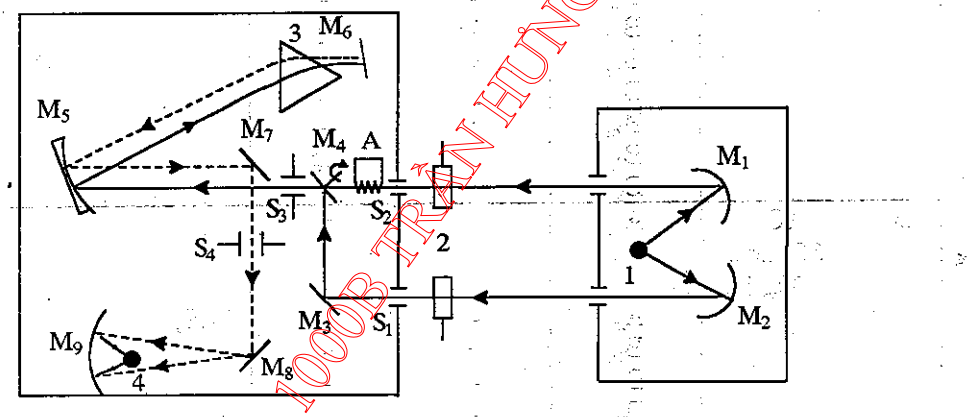
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Sơ đồ phổ kế hồng ngoại hai chùm tia tán sắc được chỉ ra trên hình 2.12: từ nguồn sáng phát ra hai chùm tia song song, một đi qua mẫu, một đi qua cuvet so sánh, sau đó chập lại đi qua khe vào S_3 đến lăng kính (hoặc cách tử) rồi qua khe ra S_4 đi đến đêtectơ.



Hình 2.11. Sơ đồ phổ kế hồng ngoại một chùm tia dùng kính lọc. 1- nguồn sáng; 2-cuvet; 3-đêtectơ; 4-bơm; 5-pin; 6-cửa sổ cuvet.



Hình 2.12. Sơ đồ phổ kế hồng ngoại hai chùm tia tán sắc. 1- nguồn sáng; 2-cuvet mẫu và cuvet so sánh; 3-bộ đơn sắc; 4-đêtectơ. (S_1, S_2 là cửa sổ, M_1 - M_9 là gương, S_3, S_4 là khe vào và khe ra)

Nguồn sáng cho máy phổ hồng ngoại thường dùng đèn Nernst (hỗn hợp oxit kim loại 85% ZrO_2 và 15% Y_2O_3), đèn Globa (silic cacbua SiC_2), đèn Nicrom (dây đốt niken-crom), nhiệt độ đốt nóng khoảng 700-800°C.

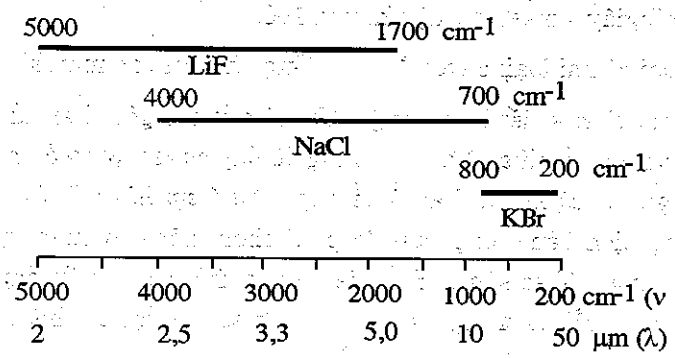
Lăng kính gồm 3 cái chế tạo từ các vật liệu KBr, NaCl và LiF vì mỗi loại chỉ cho một vùng ánh sáng hồng ngoại đi qua *(hình 2.13)*. Cách tử chế tạo bằng thủy tinh, trên mỗi milimet được vạch từ 200 đến 300 vạch cách đều nhau.

Đetectơ cho phổ kế hồng ngoại thường hay dùng là đetectơ tế bào nhân quang, cặp nhiệt điện hoặc hỏa nhiệt.

DẠY KÈM TOÁN - LÍ - HÓA 100B TRẦN HƯNG ĐẠO TP QUY NHƠN

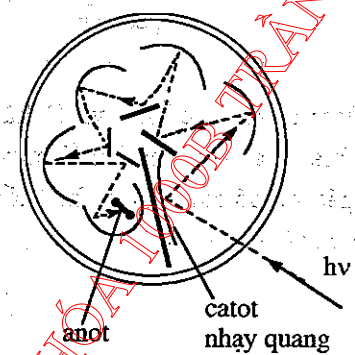
https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM



Hình 2.13 *Vùng ánh sáng hồng ngoại truyền qua được các vật liệu.*

Đetectơ tế bào nhân quang gồm nhiều lá kim loại trên đó phủ bột kim loại nhạy sáng như selen, silic. Khi có một photon đập vào bề mặt kim loại sẽ phát ra hàng trăm electron, các electron này lại chuyển động đến lá kim loại thứ hai, và mỗi electron đập vào sẽ phát ra hàng trăm electron nữa và cứ tiếp tục như vậy đi đến các lá kim loại sau, cuối cùng có hàng chục triệu electron được phát ra từ một photon. Các electron này đi đến anot, tạo ra một dòng điện mà điện thế của nó tỉ lệ với cường độ ánh sáng đập vào *(xem hình 2.14)*.



Hình 2.14 *Sơ đồ hoạt động của đetectơ tế bào nhân quang.*

Đetectơ cặp nhiệt điện được chế tạo từ hai thanh kim loại khác nhau như bismut và antimoan, tạo ra một điện thế nhỏ khi đốt nóng ở chỗ tiếp giáp nhau bằng bức xạ hồng ngoại. Chỉ cần có một sự thay đổi rất nhỏ nhiệt độ của của bức xạ chiếu vào đã làm biến thiên cường độ dòng điện sinh ra(nhiệt độ bức xạ thay đổi 10^{-6} °K, điện thế thay đổi 6-8 μV/μW). Đetectơ cặp nhiệt điện có trở kháng thấp nên thường được nối với bộ tiền khuếch đại có trở kháng cao.

Đetectơ hỏa nhiệt được chế tạo từ những miếng đơn tinh thể của các chất hỏa nhiệt. Chúng là chất cách điện (chất điện môi) có tính chất điện và nhiệt rất đặc biệt, như các chất triglixin sunfat (TGS), đơteritriglixin sunfat (DTGS), đơteri L-alanin triglixin sunfat (DLATGS),v.v...Các chất này được kẹp vào giữa hai điện cực đóng vai trò một tụ điện mà điện dung của nó phụ thuộc mạnh vào sự thay đổi nhiệt độ. Khi nối hai điện cực vào một mạch điện sẽ xuất hiện một dòng điện mà điện thế của nó thay đổi rất nhạy với sự thay đổi nhiệt độ của bức xạ hồng ngoại chiếu vào.

Đêtectơ hỏa nhiệt có độ nhạy cao và thời gian đáp ứng nhanh, với điện trở tải 100 MΩ thì

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

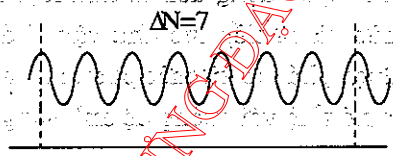
thời gian đáp ứng là 1 ms (miligiây - msec) và độ nhạy là 100.

Cuvet đo phổ hồng ngoại có hai loại: cuvet đo mẫu lỏng và cuvet đo mẫu khí.

Cuvet đo mẫu lỏng (chất tinh khiết hay dung dịch) có cấu tạo gồm hai tấm cửa sổ bằng NaCl, KBr hoặc LiF, một vòng đệm ở giữa có độ dày bằng độ dày cuvet, vòng đệm và giá đỡ bên ngoài, ở một tấm cửa sổ và giá đỡ có khoan hai lỗ để nạp mẫu *(xem hình 2.15)*. Trên cuvet có ghi rõ độ dày lớp mỏng dung dịch bên trong, khi đo phải chọn một cặp cuvet có độ dày như nhau để đựng mẫu chất và dung môi so sánh. Để kiểm tra chính xác chiều dày cuvet, người ta đặt một cuvet không vào máy rồi đo trong một vùng bước sóng được tín hiệu phổ hình sin, rồi tính theo công thức:

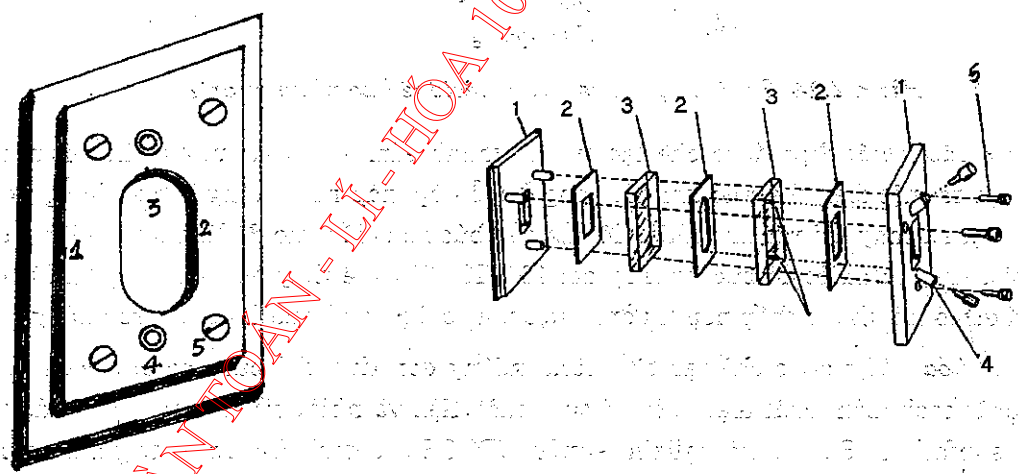
$$d = \frac{\Delta N}{2(\nu_1 - \nu_2)}$$

d là chiều dày lớp mỏng cuvet, ΔN là số đỉnh cực đại, ν_1 và ν_2 là số sóng. Ví dụ với phổ hình sin dưới đây ta có:



$$d = \frac{\Delta N}{2(\nu_1 - \nu_2)} = \frac{7}{2(3200 - 2600)} = 0{,}0116\text{cm}$$

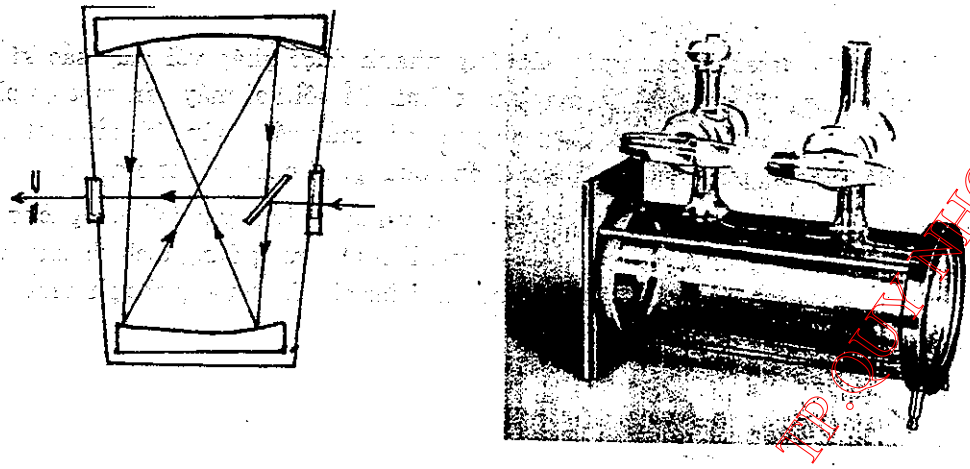
Các mẫu khí được đo bằng một loại cuvet đặc biệt, vì độ hấp thụ của các khí thấp nên đường ánh sáng qua mẫu phải dài. Chiều dài thực của mỗi cuvet khí chỉ độ 10 cm nhưng đường ánh sáng đi qua phải dài hàng mét, do đó cần có một hệ thống gương đặt trong cuvet để ánh sáng đi qua lại mẫu nhiều lần *(xem hình 2.16)*.



***Hình 2.15** Sơ đồ cuvet đo mẫu lỏng*
1- Giá đỡ; 2-Vòng đệm; 3-Cửa sổ; 4-Lỗ bơm mẫu; 5-ốc vặn.

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 100% TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

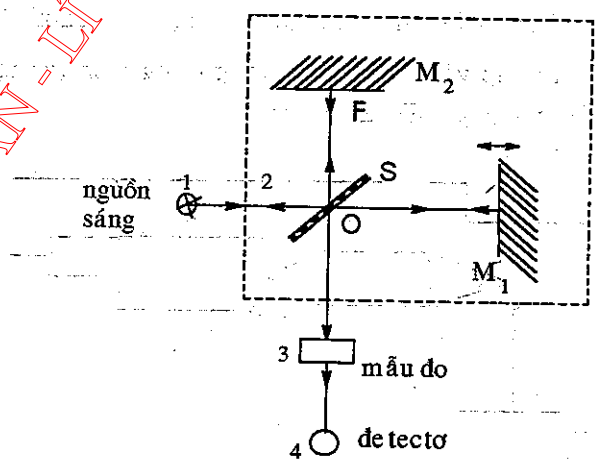


Hình 2.16 Sơ đồ cuvet đo mẫu khí.

Phổ kế hồng ngoại biến đổi Fourier (FT-IR)

Phổ kế hồng ngoại hiện đại là loại phổ kế biến đổi Fourier. Loại phổ kế mới này khác loại phổ kế tán sắc cũ là thay bộ đơn sắc (lăng kính hoặc cách tử) bằng một giao thoa kế Michelson như sơ đồ chỉ ra ở hình 2.17.

Cấu tạo của giao thoa kế Michelson gồm gương phẳng di động M_1, một gương M_2 cố định và một tấm kính phân tách ánh sáng S. Ánh sáng từ nguồn chiếu vào tấm kính S tách làm hai phần bằng nhau, một phần chiếu vào gương M_1 và một phần khác chiếu vào gương M_2, sau đó phản xạ trở lại qua kính S, một nửa trở về nguồn, còn một nửa chiếu qua mẫu đi đến đêtectơ. Do gương M_1 di động làm cho đoạn đường của tia sáng đi đến gương M_1 rồi quay trở lại có độ dài lớn hơn đoạn đường tia sáng đi đến gương M_2 rồi quay trở lại và được gọi là sự trễ. Do sự trễ này đã làm cho ánh sáng sau khi đi qua giao thoa kế biến đổi từ tần số cao xuống tần số thấp. Sau đó ánh sáng qua mẫu bị hấp thụ một phần rồi đi đến đêtectơ, nhờ kĩ thuật biến đổi Fourier nhận được một phổ hồng ngoại như bình thường ghi trên phổ kế hồng ngoại tán sắc nhưng có độ phân giải và tỉ số tín hiệu/nhiễu (S/N) cao hơn, nghĩa là phổ nhận được có chất lượng tốt hơn, đặc biệt thời gian ghi phổ nhanh, chỉ có 30 giây.



Hình 2.17 Sơ đồ phổ kế hồng ngoại FT-IR: 1-nguồn sáng; 2-giao thoa kế Michelson; 3-mẫu đo; 4-đêtectơ.

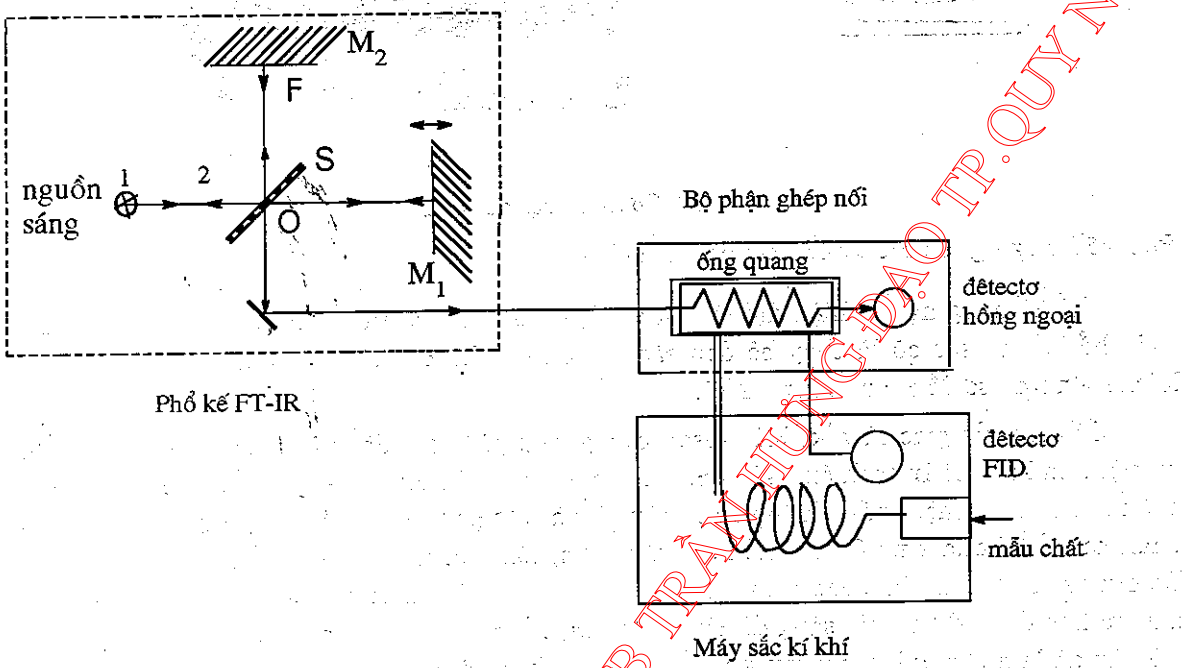
DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 10&11 TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Phổ kế FT-IR dùng đêtectơ hỏa nhiệt đáp ứng nhanh được ghép với máy sắc kí khí (GC/FT-IR) làm chức năng một đêtectơ cho máy sắc kí khí. Để nối hai máy cần một bộ phận ghép nối như sơ đồ được chỉ ra ở hình 2.18. Các hợp phần của mẫu cần phân tích lần lượt đi ra khỏi cột sắc kí được dẫn vào bộ phận ghép nối (gọi là ống quang) để ghi phổ hồng ngoại.

Mẫu ghi quang phổ hồng ngoại có thể ở dạng rắn (ép với bột KBr hay nujol), dạng lỏng hay dung dịch và ở dạng khí. Lượng mẫu cần khoảng 1-2 mg. Khi ghi trong dung dịch thường dùng dung môi được tinh chế sạch (PA) hoặc sử dụng loại dung môi đặc biệt dành riêng cho ghi phổ.

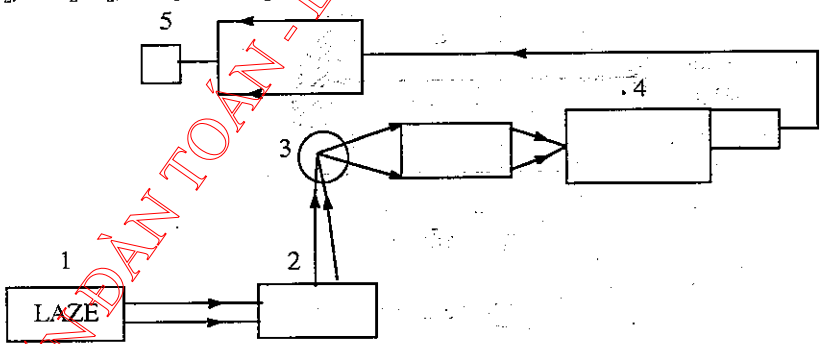


***Hình 2.18** Sơ đồ máy sắc kí khí hồng ngoại (GC/FT-IR).*

2.2.2. Phổ kế Raman laze

Phổ kế Raman hiện nay thường dùng nguồn sáng là tia laze vùng nhìn thấy (khí Ar 458-528 nm, khí Kr 476-799 nm, khí He-Ne 632,8 nm) gồm các bộ phận chính *(xem hình 2.19)*.

Mẫu đo có thể ở dạng rắn (ép với bột KNO_3), dạng dung dịch (dung môi $CHCl_3$, $CDCl_3$, CCl_4, CS_2, CH_2Cl_2, CH_3OH, H_2O, C_6H_6, C_6D_6) hoặc dạng khí.

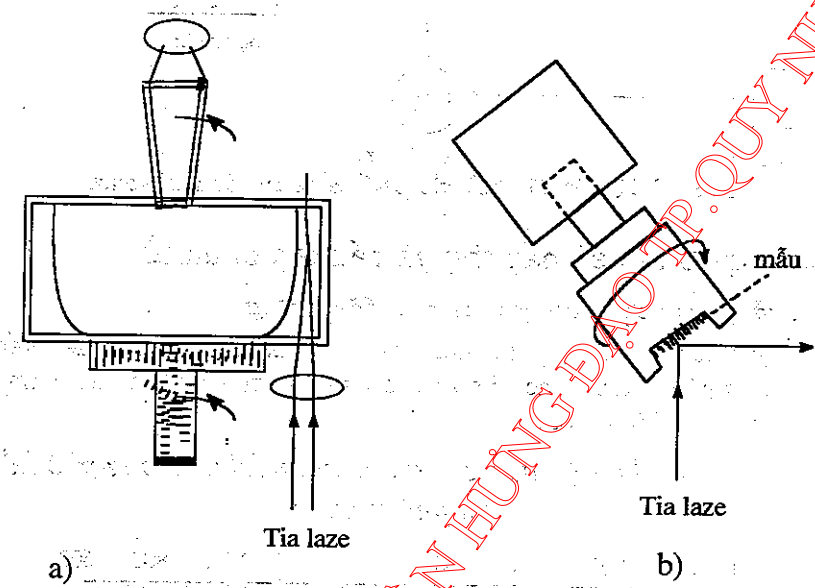


***Hình 2.19** Sơ đồ khối của phổ kế Raman laze. 1-nguồn laze khí CW (sóng liên tục); 2-hệ thống chiếu sáng mẫu; 3-mẫu đo; 4-monocromato; 5-bộ phận nhận tín hiệu (tế bào quang, khuếch đại, tự ghi).*

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 100B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

Cuvet đo mẫu lỏng là một ống thủy tinh có đường kính 6 cm, có thể quay liên tục trong khi đo *(hình 2.20a)*. Mẫu rắn được ép thành màng mỏng với bột KNO_3 rồi đặt vào cuvet mẫu rắn *(hình 2.20b)*.



***Hình 2.20** Sơ đồ a)Cuvet đo mẫu lỏng phổ Raman; b) Cuvet đo mẫu rắn phổ Raman.*

2.2.3. Phổ kế quay

Phổ kế quay được chế tạo theo 2 kĩ thuật khác nhau. Phần sóng ngắn được đo trên máy phổ kế quang học theo nguyên lí cấu tạo thông thường, còn phần sóng dài tương ứng với phần vi sóng (MW) được đo trên thiết bị cao tần. Trong vùng quang học chỉ có các phân tử nhỏ gồm hai nguyên tử như HF, HCl, hấp thụ còn các phân tử lớn hơn hấp thụ trong vùng vi sóng do momen quán tính của chúng lớn hơn.

Trên hình 2.21 chỉ ra sơ đồ khối của phổ kế quay vùng vi sóng, nó gồm các bộ phận chính:

(1) Klisron phát nguồn vi sóng có công suất cỡ milioat và chiều dài sóng tương ứng centimet (cm) đến milimet (mm).

(2) Bộ nguồn.

(3) Ống dẫn vi sóng và cuvet mẫu.

(4) Đêtecto và khuếch đại.

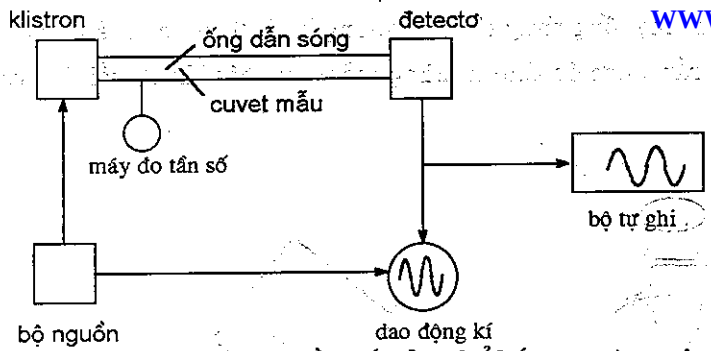
(5) Dao động kí.

(6) Bộ tự ghi.

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 100B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM



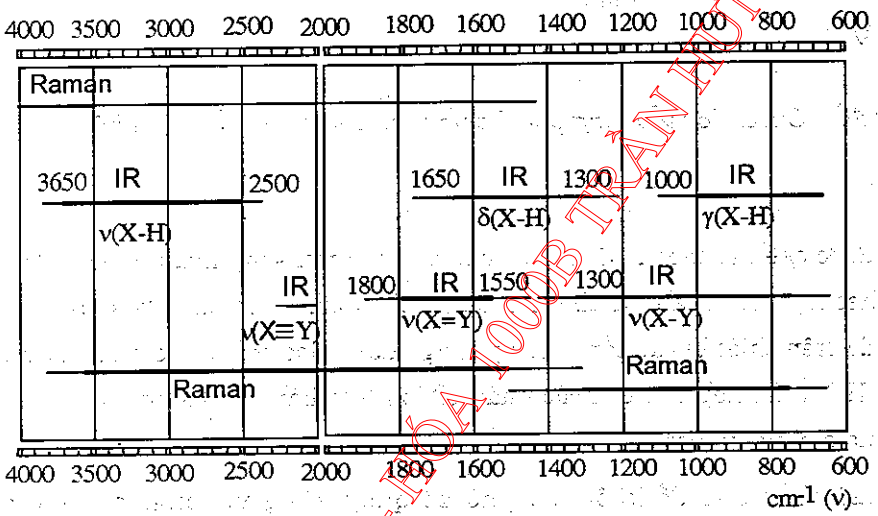
Hình 2.21 Sơ đồ khối của phổ kế quay vùng vi sóng.

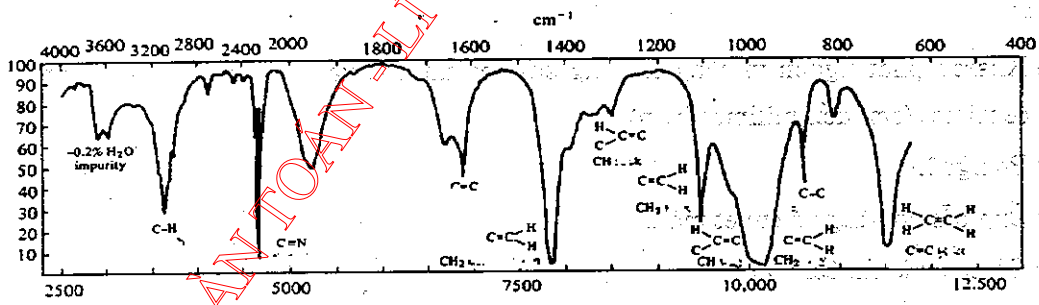
2.3. Sự liên quan giữa tần số hấp thụ và cấu tạo phân tử

2.3.1. Các ảnh hưởng làm dịch chuyển tần số đặc trưng

Tần số dao động của các nguyên tử phụ thuộc vào hằng số lực của liên kết và khối lượng của chúng, do đó các nhóm chức khác nhau có tần số hấp thụ khác nhau nằm trong vùng từ 5000-200 cm^{-1} *(bảng 2.4 và hình 2.22).*

Bảng 2.4 *Vùng hấp thụ đặc trưng của các nhóm chức trong phổ hồng ngoại và phổ Raman.*





Hình 2.22 Phổ hồng ngoại của acrylonitrin CH_2=CH-C≡N.

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP.QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Ảnh hưởng của dung môi, nồng độ, nhiệt độ và trạng thái tập hợp đến vị trí của cực đại hấp thụ:

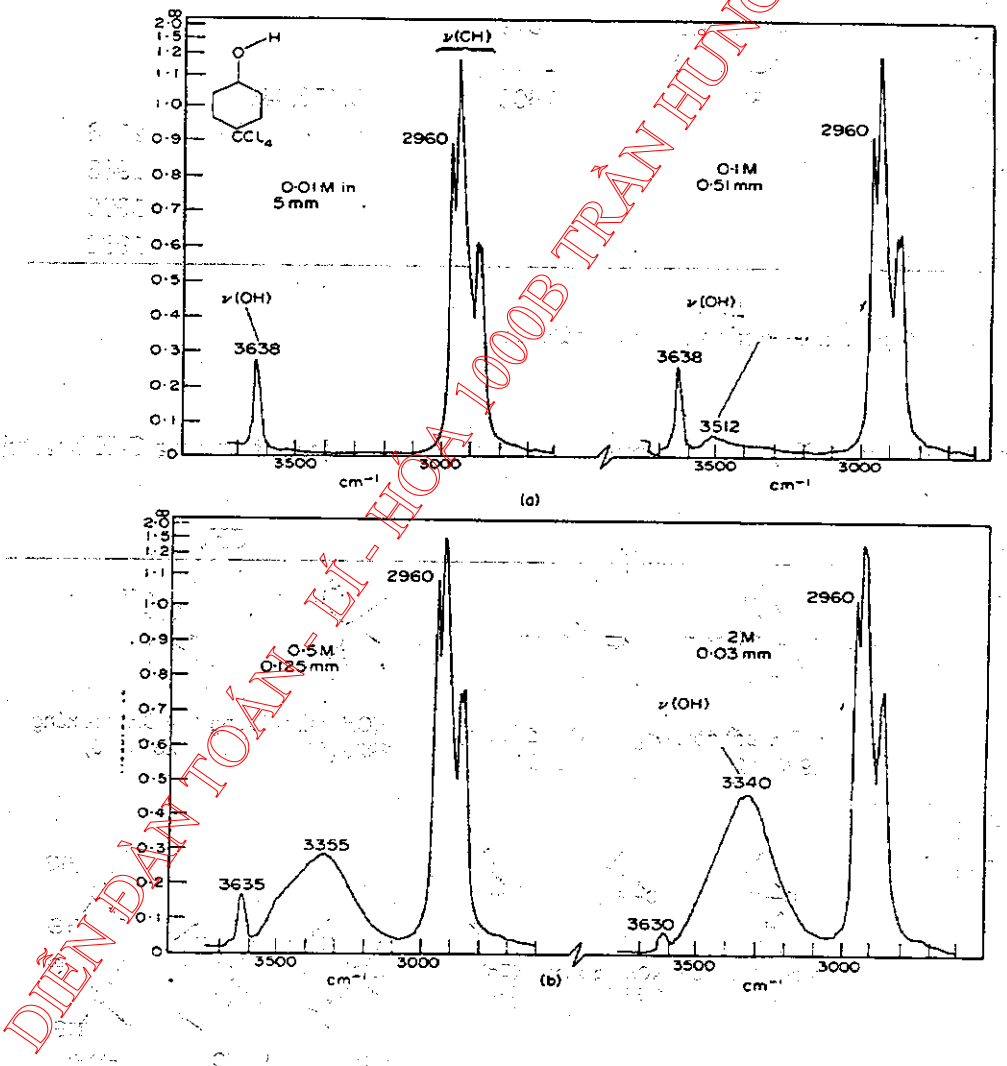
a-Dung môi: có ảnh hưởng đến sự thay đổi vị trí của các cực đại hấp thụ tùy theo độ phân cực của chúng, ví dụ như sự thay đổi giá trị $\nu_{c=o}$ của axeton *(bảng 2.5)*.

***Bảng 2.5** Ảnh hưởng của dung môi đến $\nu_{C=O}$ của axeton.*

Dung môi	Độ phân cực	$\nu_{C=O}$, cm^{-1}	$I.10^{-3}$, $l.mol^{-1}.cm^{-2}$
(khí)	-	1737	12
n-hexan	1,9	1723	15,3
benzen	2,2	1716	16,5
clorofom	4,8	1712	19,5

b-Nồng độ dung dịch: cũng gây ảnh hưởng đến sự thay đổi vị trí của đỉnh hấp thụ, đặc biệt đối với các chất có khả năng tạo cầu liên kết hidro như ancol, phenol, amin,...*(hình 2.23)*.

c-Ảnh hưởng của nhóm thế: Các nhóm thế trong phân tử cũng gây ảnh hưởng đến sự thay đổi vị trí đỉnh hấp thụ tùy theo nhóm thế gây hiệu ứng cảm ứng hay liên hợp *(bảng 2.6)*.



***Hình 2.23** Đỉnh hấp thụ của nhóm OH và CH của xiclohexanol trong CCl_4 với các nồng độ khác nhau.*

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org

Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú

WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Bảng 2.6 Ảnh hưởng của nhóm thế đến vị trí đỉnh hấp thụ $\nu_{C\equiv N}$ của benzonitrin.

Nhóm thế	$\nu_{C\equiv N}$, cm^{-1}
$-NO_2$	2237
-H	2232
$-CH_3$	2231
-OH	2230
$-N(CH_3)_2$	

d-Phức chất: Khi tạo phức, tần số hấp thụ đặc trưng của nhóm chức thay đổi theo kim loại trung tâm và số phối trí *(bảng 2.7)*.

Bảng 2.7 Tần số đặc trưng của một số phức chất.

Phức	ν_{NH3}, cm^{-1}	δ_{NH3}, cm^{-1}	ν_{M-N}, cm^{-1}	$\nu_{C=O}$, cm^{-1}
NH_3	3414,3336	1628		
$Ni(NH_3)_6(ClO_4)_2$	3397,3312	1318		
$Co(NH_3)_6(ClO_4)_2$	3320,3240	1630		
$Co(NH_3)_6Cl_3$	3070	1603	499,476,449	
CO				2143
$Cr(CO)_6$				1988
$Mo(CO)_6$				1990
$W(CO)_6$				1982

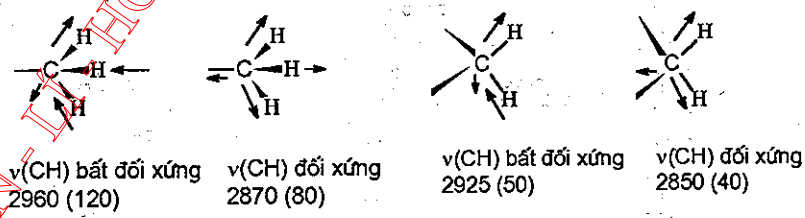
2.3.2. Tần số đặc trưng của các nhóm chức hữu cơ

ANKAN

Các ankan chứa nhóm CH_2 và CH_3 trong phân tử có các dao động đặc trưng C-H hoá trị và biến dạng:

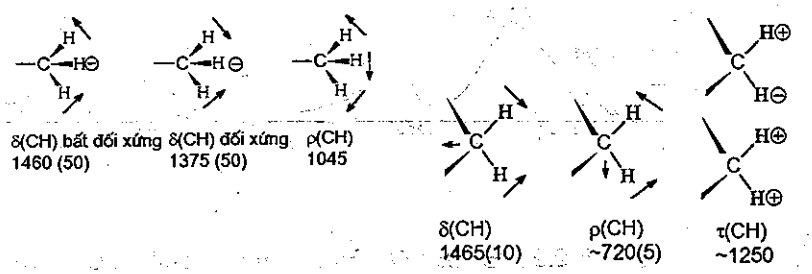
Dao động hoá trị

2850-2960 cm^{-1}



Dao động biến dạng

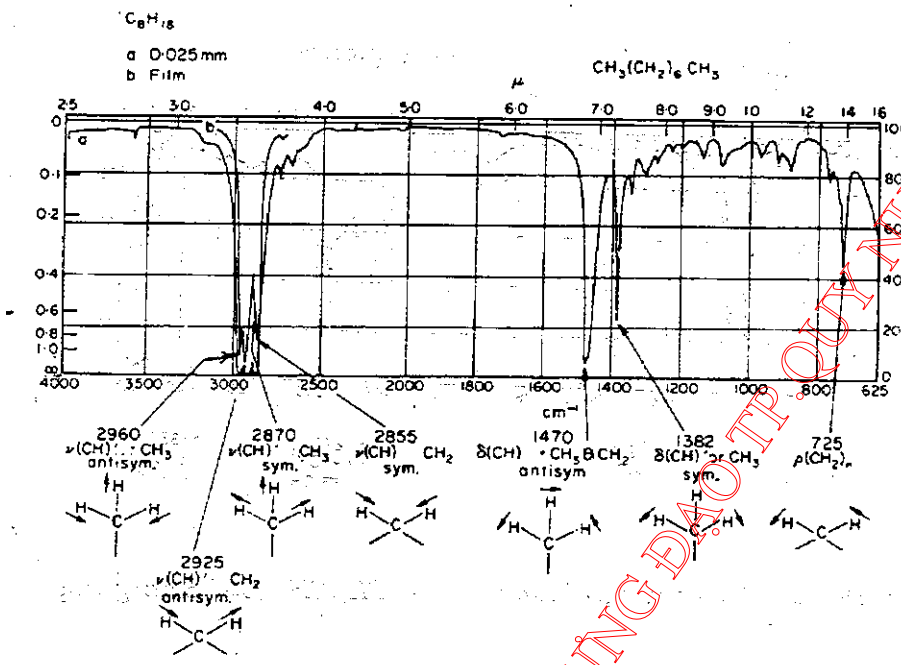
720,1000-1465 cm^{-1}



DIỄN ĐÀN TOÁN - LÝ HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

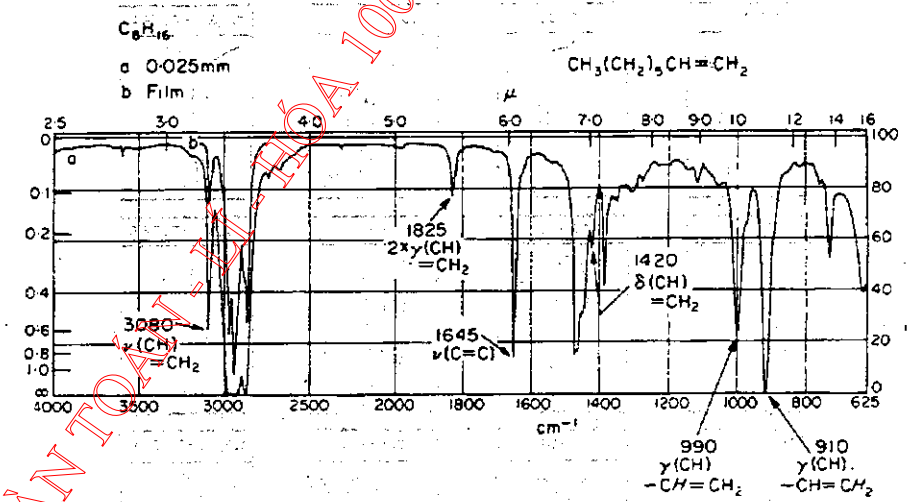


Hình 2.24 Phổ hồng ngoại của n-octan $CH_3(CH_2)_6CH_3$ dạng lỏng.

ANKEN

Dao động hoá trị ν_{C-H} ≈3000 cm^{-1}

$\nu_{C=C}$ 1600-1650 cm^{-1}



Hình 2.25 Phổ hồng ngoại của n-octen-1 $CH_3(CH_2)_5CH=CH_2$ dạng lỏng.

ANKIN

Dao động hoá trị ν_{C-H} 3300 cm^{-1}

$\nu_{C\equiv C}$ 2150 cm^{-1}

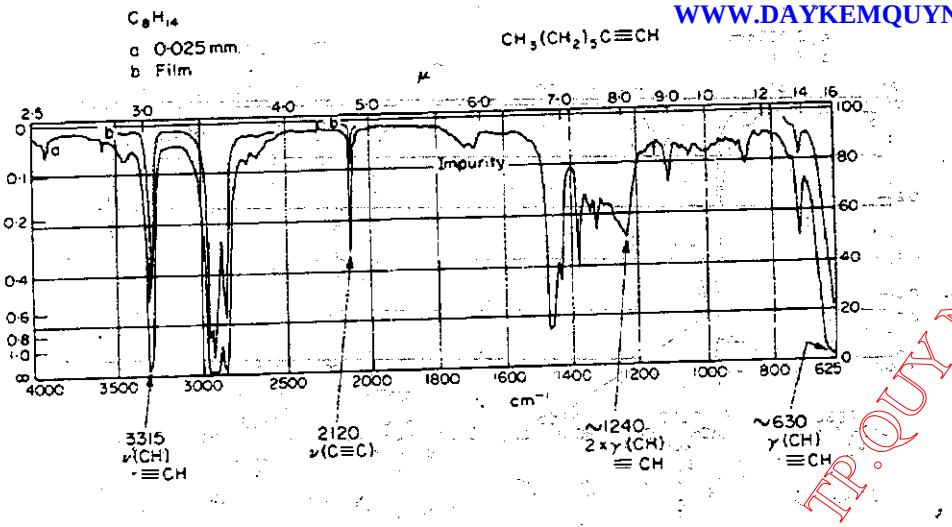
DIỄN ĐÀN TOÁN - LÝ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org

Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú

WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM



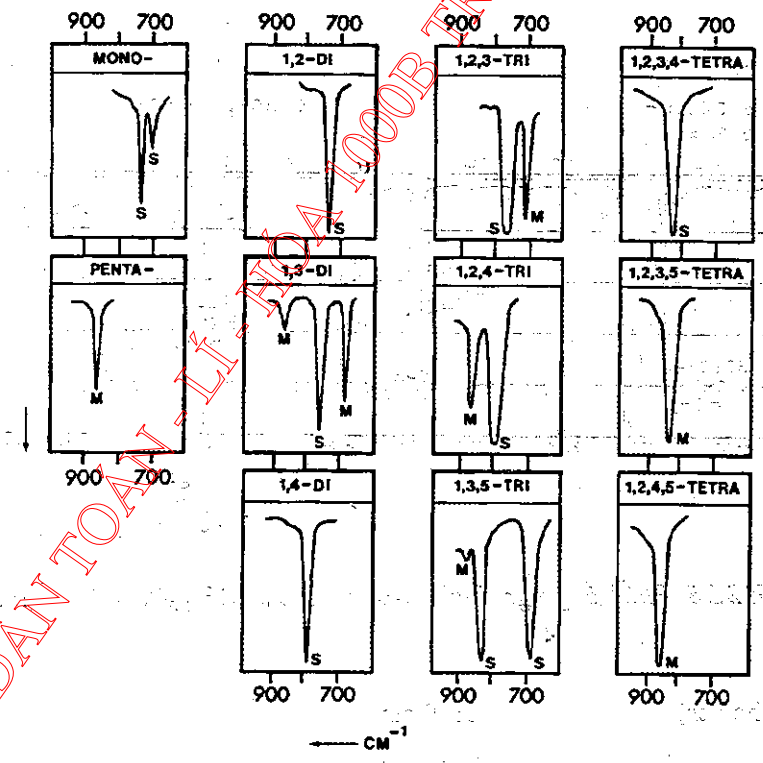
Hình 2.26 Phổ hồng ngoại của n-octin-1 $CH_3(CH_2)_5C{\equiv}CH$ dạng lỏng.

ANLENIC

Dao động hoá trị	$\nu_{C=C=C}$	1960-1940 cm^{-1}

HIDROCACBON THƠM

Dao động hoá trị	ν_{C-H}	3050 cm^{-1}
	$\nu_{C=C}$	1600, 1500, 1470 cm^{-1}
Dao động biến dạng	δ_{C-H}	700-900 cm^{-1}



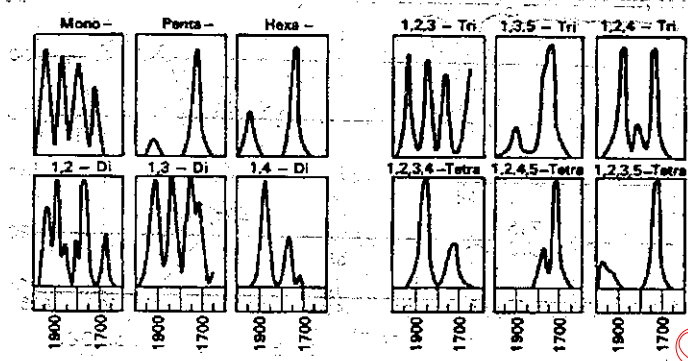
Hình 2.27 Dao động biến dạng ngoài mặt phẳng C-H của vòng benzen thế.

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

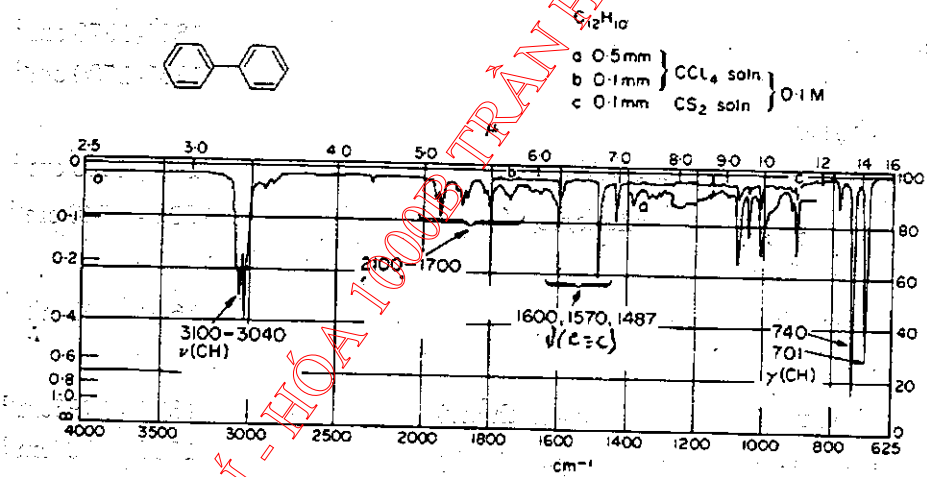
https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Dao động tổ hợp (cường độ rất yếu) 1900-1750 cm^{-1}.



Hình 2.28 Dao động tổ hợp của vòng benzen thế.



Hình 2.29 Phổ hồng ngoại của biphenyl trong CCl_4.

ANCOL/PHENOL

Dao động hoá trị:	$\nu_{OH\ tự\ do}$ (trong dung dịch loãng)	3600 cm^{-1}
	$\nu_{OH\ liên\ hợp}$ (trong dung dịch đặc)	2500-3200 cm^{-1}
	ν_{C-O}	1150, 1100 cm^{-1}

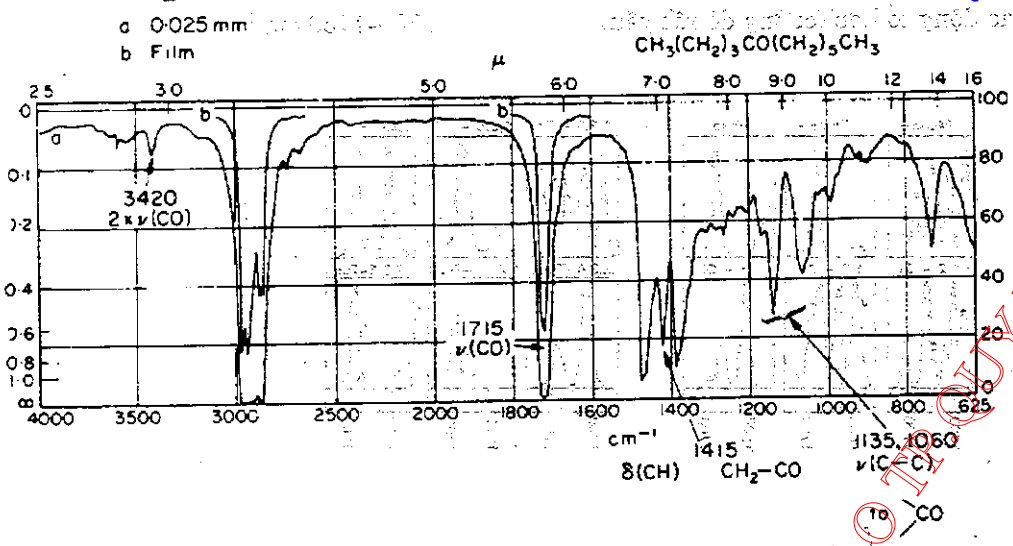
ANDEHIT/XETON

Dao động hoá trị:	$\nu_{C=O}$	1750-1650 cm^{-1}

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 10000 TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM



Hình 2.30 Phổ hồng ngoại của n-butyl-n-hexylxeton $CH_3(CH_2)_3CO(CH_2)_5CH_3$ dạng lỏng.

ANHIDRIT

Dao động hoá trị: $\nu_{C=O}$ 1800-1870 cm^{-1}
1750-1790 cm^{-1}

AXIT CACBOXYLIC

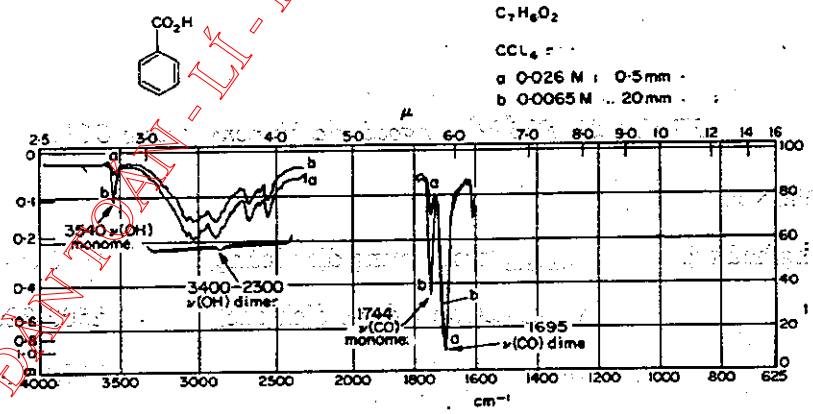
Dao động hoá trị: $\nu_{C=O}$ (dime) 1720-1680 cm^{-1}
$\nu_{C=O}$ (monome) 1800 - 1740 cm^{-1}

MUỐI AXIT CACBOXYLIC

Dao động hoá trị: $\nu_{C=O}$ 1650-1600 cm^{-1}

CLORUA AXIT

Dao động hoá trị: $\nu_{C=O}$ (thẳng) 1810 - 1795cm^{-1}
Dao động hoá trị: $\nu_{C=O}$ (thơm) 1785 - 1765cm^{-1}



Hình 2.31 Phổ hồng ngoại của axit benzoic C_6H_5COOH.

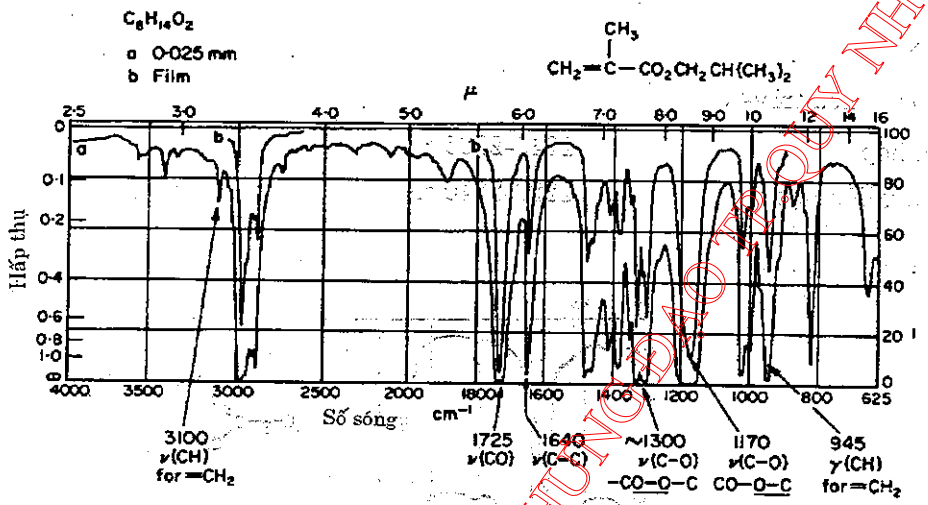
DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

ESTE

Dao động hoá trị: $\nu_{C=O}$ 1720 - 1750cm^{-1}



Hình 2.32 Phổ hồng ngoại của isobutyl metacrylat.

AMIN

Bậc 1	ν_{NH2}	2 đỉnh	3600 và 3500 cm^{-1}
	δ_{NH2}		1650 cm^{-1}
	ν_{C-N}	vòng thơm	1150-1200 cm^{-1}
			1030-1120 cm^{-1}
Bậc 2	ν_{NH}	1 đỉnh	3500 cm^{-1}
	δ_{NH}		1650 cm^{-1}
	ν_{C-N}		1150-1200 cm^{-1}
			1080-1150 cm^{-1}
Bậc 3	ν_{C-N}		1130-1230 cm^{-1}
			1030-1130 cm^{-1}

AMIT

$\nu_{C=O}$	amit I	1600 -1690 cm^{-1}
δ_{N-H}	amit II	1500-1600 cm^{-1}
ν_{N-H}		3500 và 3600 cm^{-1} (-NH_2)
		3500 cm^{-1} (-NH-)

AZOMETIN

Dao động hoá trị $\nu_{C=N}$ 1620-1650 cm^{-1}

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

NITRO

Dao động hoá trị $\nu_{NO2\ (as)}$ 1530 cm^{-1}

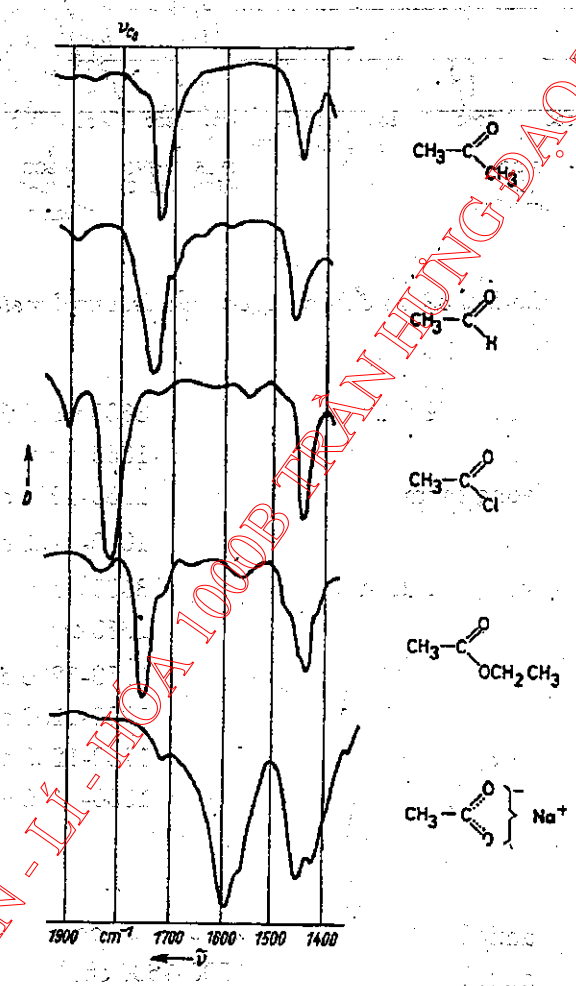
$\nu_{NO2\ (s)}$ 1330 cm^{-1}

NITRIN

Dạo động hoá trị $\nu_{C\equiv N}$

liên hợp 2240-2265 cm^{-1}

không liên hợp 2220-2240 cm^{-1}

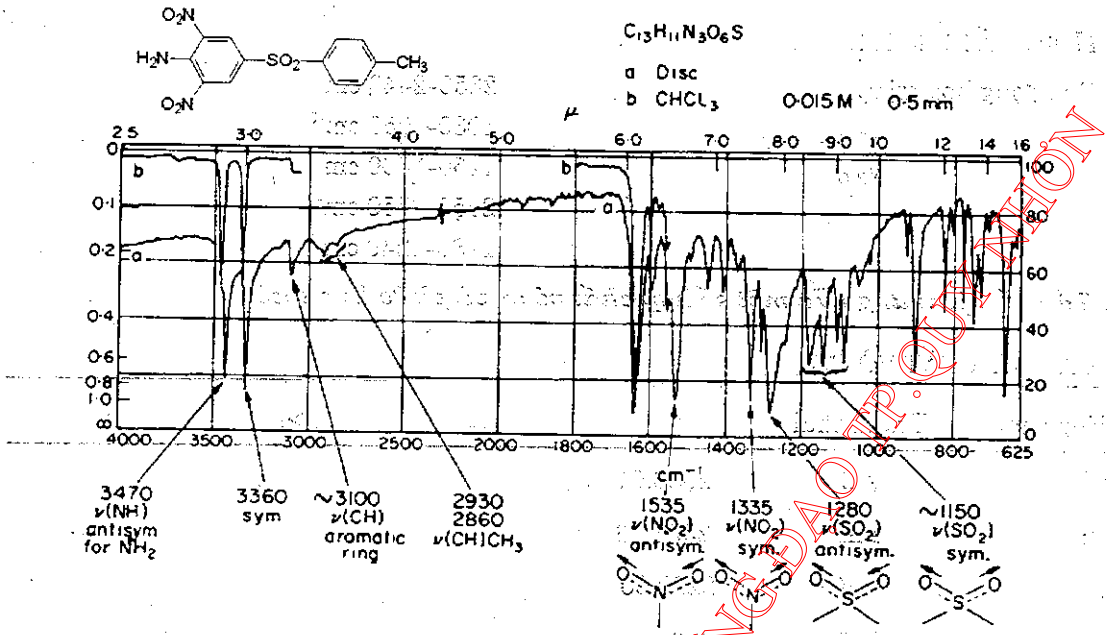


Hình 2.33 Hấp thụ của nhóm C=O ở một số dẫn xuất axit cacboxylic, andehit và xeton.

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 10 CB TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM



Hình 2.34 Phổ hồng ngoại của amin thơm phức tạp.

XIAMIT, ISOXIAMIT

Dao động hoá trị ν_{N-C}	xiamit	2000-2180 cm^{-1}
	isoxiamit	2080-2180 cm^{-1}

HALOGEN

Dao động hoá trị	ν_{C-F}	1000-1400 cm^{-1}
	ν_{C-Cl}	600-800 cm^{-1}
	ν_{C-Br}	500-750 cm^{-1}
	ν_{C-I}	< 500 cm^{-1}

HỢP CHẤT LƯU HUỲNH

Dao động hoá trị	ν_{S-H}	2550-2600 cm^{-1}
	$\nu_{C=S}$	1050-1200 cm^{-1}
	ν_{SO_2}	1310-1350 cm^{-1}
		1120-1160 cm^{-1}
	$\nu_{SO_2N<}$	1330-1370 cm^{-1}
		1160-1180 cm^{-1}
	ν_{C-S}	800-600cm^{-1}
	ν_{S-O}	700-900 cm^{-1}

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

HỢP CHẤT PHOTPHO

Dao động hoá trị ν_{P-H}	2350-2440 cm^{-1}
ν_{P-O-R}	1030-1050 cm^{-1}
ν_{P-O}	1250-1300 cm^{-1}
ν_{POOH}	2550-2750 cm^{-1}
	1180-1240 cm^{-1}

2.3.3. Tần số đặc trưng của một số hợp chất vô cơ và phức kim loại

CÁC HỢP CHẤT VÔ CƠ

Hợp chất	Trạng thái	ν_1	ν_2	ν_3	ν_4
HCl	khí	2886,01			
HBr	khí	2558,76			
HI	khí	2229,60			
HF	khí	3961,64			
CO_2	khí	1337	667	2349	
HCN	khí	3311	712	2097	
H_2O	khí	3657	1595	3756	
D_2O	khí	2671	1178	2778	
NO_2	khí	1318	750	1618	
SO_2	khí	1151	518	1362	
NH_3	khí	3336	932	3414	1628
$CaCO_3$	rắn		879	1429	706
KNO_3	rắn	1049	828	1768	716
$Pb(NO_{3)2}$	rắn	1018	807	1400	723
BF_3		888	891	1145	480
BCl_3		471	460	956	243
SO_3	khí	1068	496	1391	529
H_2O_2	khí	890	3610	1260	465
H_2S_2	khí		2557	895	
HN_3	khí	3336	2140	1274,1150	522,672
SiH_4		2180	970	2183	910
SnH_4			758	1901	677
$SnCl_4$		368	106	403	131
$PbCl_4$		327	90	348	90

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

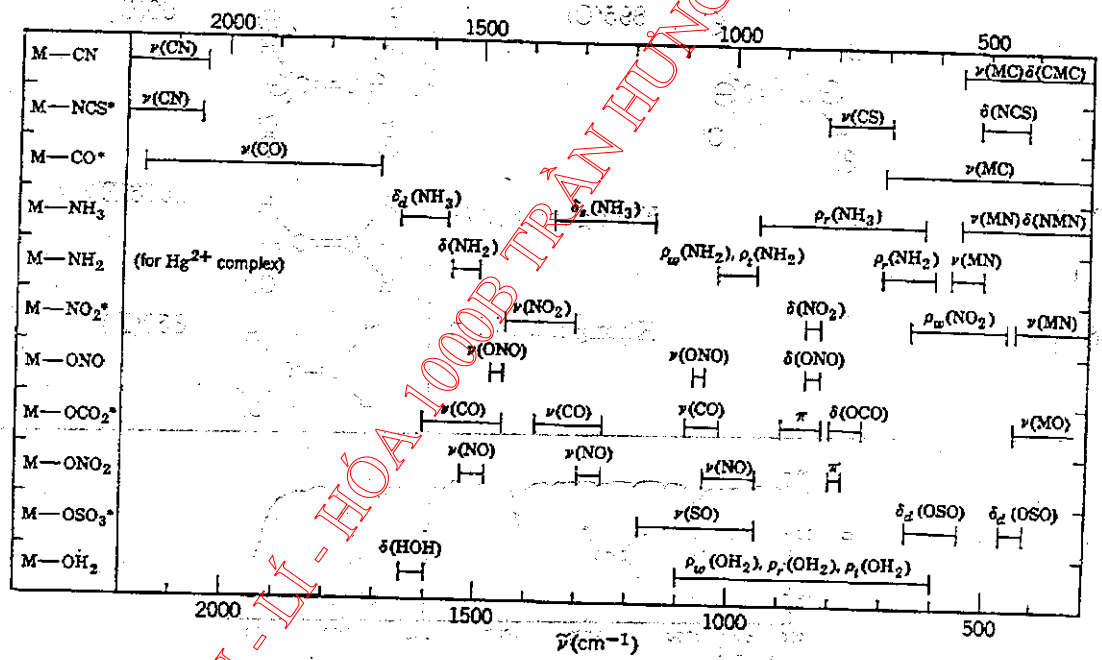
CÁC ION VÔ CƠ

Dao động hoá trị:

$\nu(NH_4^+)$	3030-3300 cm^{-1}
$\nu(CN, CNO, CNS)$	2000-2200 cm^{-1}
$\nu(CO_3^{2-})$	1410-1450 cm^{-1}
$\nu(SO_4^{2-})$	1080-1130 cm^{-1}
$\nu(NO_3^-)$	1350-1380 cm^{-1}
$\nu(NO_2^-)$	1230-1250 cm^{-1}
$\nu(PO_4^{3-})$	1000-1100 cm^{-1}

PHỨC KIM LOẠI

Phức kim loại có tần số đặc trưng các dao động của phần phối trí và liên kết giữa kim loại với phối trí.



Hình 2.35 Đặc trưng hấp thụ của một số phức kim loại (M là kimloại).

2.3.4. Tần số đặc trưng của nhóm chức trong phổ Raman

Vùng hấp thụ đặc trưng của nhóm chức trong phổ Raman và phổ hồng ngoại như nhau, nhưng có các dao động xuất hiện trong vùng phổ hồng ngoại lại không xuất hiện trong phổ Raman và ngược lại là do điều kiện kích thích dao động riêng của chúng gây ra. Ví dụ phổ hồng ngoại và phổ Raman của *trans*-dicloetylen dưới đây *(hình 2.36)* và bảng đặc trưng các dao động tương ứng của chúng *(bảng 2.8)* có thể chứng minh nhận xét trên.

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP QUY NHƠN

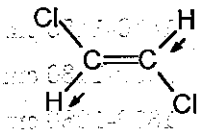
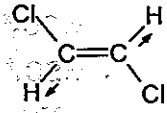
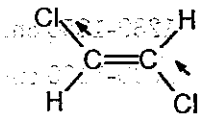
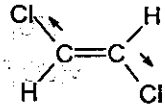
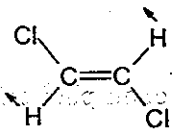
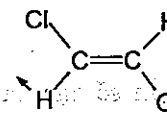
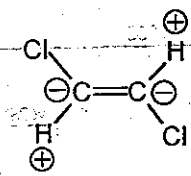
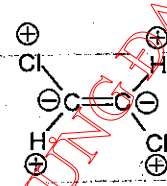
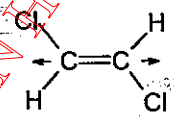
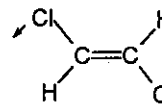
https://tieulun.hopto.org

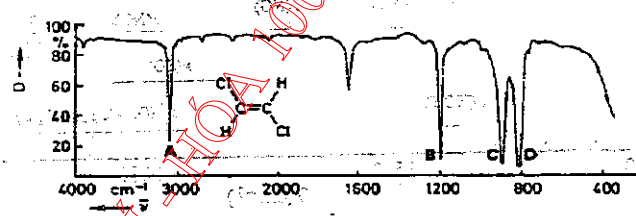
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú

WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

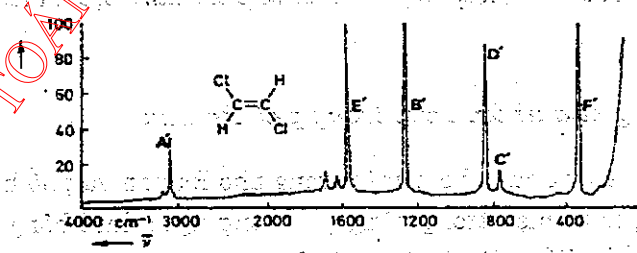
WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Bảng 2.8 *Các dao động và tần số đặc trưng của trans-dicloetylen.*

	Loại dao động	*Phổ hồng ngoại*	*Loại dao động*	*Phổ Raman*
ν_{C-H}		3090(A)		3070(A')
ν_{C-Cl}		817(D)		844(D')
δ_{C-H}		1200(B)		1270(B')
γ_{C-H}		895(C)		760(C')
$\nu_{C=C}$		Không xuất hiện		1576(E')
δ_{C-Cl}		Không xuất hiện		350(F')



(a)



(b)

Hình 2.36 *(a) Phổ hồng ngoại của trans-đicloetylen; (b) Phổ Raman của trans-đicloetylen.*

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

2.4. Ứng dụng phổ hồng ngoại trong phân tích định lượng

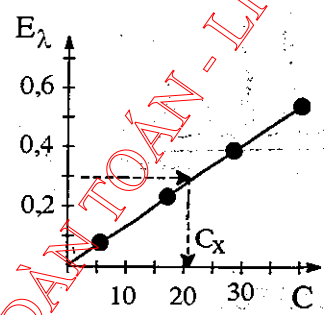
Phương pháp phổ hồng ngoại có thể được ứng dụng trong phân tích định lượng một chất trong dung dịch hay trong hỗn hợp. Cơ sở của phương pháp dựa trên phương trình định luật Lambert-Beer biểu hiện mối quan hệ giữa sự hấp thụ ánh sáng và nồng độ chất:

$$\log\frac{I_0}{I} = \varepsilon.C.d = D_\lambda$$

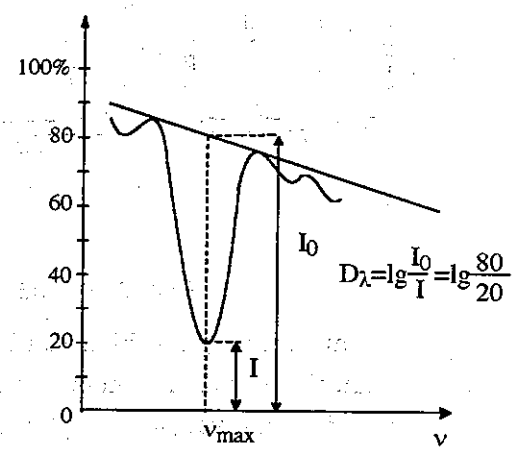
Theo phương trình trên, ở một bước sóng xác định, sự hấp thụ ánh sáng tỉ lệ với nồng độ C và chiều dày cuvet d và bản chất của chất mẫu. Như vậy khi phân tích một chất, đo ở một bước sóng xác định với một cuvet có chiều dày d đã biết thì mật độ quang D_λ chỉ còn tỉ lệ với nồng độ C của mẫu chất. Vì phương trình trên chỉ chính xác với dung dịch có nồng độ loãng nên phương pháp phân tích định lượng bằng phổ hồng ngoại chỉ áp dụng đo trong dung dịch, còn theo phương pháp ép mẫu rắn (ép KBr) thì chỉ phân tích bán định lượng.

Phương pháp phân tích định lượng nhờ phổ hồng ngoại cũng thực hiện theo cách lập đường chuẩn. Pha một loạt mẫu với nồng độ khác nhau của chất cần xác định ở dạng tinh khiết rồi đo giá trị D_λ của chúng, sau đó vẽ đồ thị biểu diễn sự phụ thuộc D_λ vào nồng độ C như hình 2.37. Vấn đề khó khăn và mắc sai số trong phương pháp này là tính tỉ số I_0/I. Về nguyên tắc, giá trị I_0 và I có thể xác định trên phổ theo cách tìm đường nền rồi đo giá trị I_0 và I như trên hình 2.38. Khó khăn ở đây là xác định vị trí đường nền sao cho sai số phương pháp là nhỏ nhất, bởi vì trên đường cong phổ có sự che phủ nhau của các đỉnh cho nên có thể có một số vị trí khác nhau khi vẽ đường nền. Vì thế ngoài phương pháp đường nền, người ta còn tiến hành theo một số phương pháp khác để đạt độ chính xác cao hơn.

Sau khi thiết lập được đồ thị đường chuẩn, cần chú ý là đường chuẩn này chỉ sử dụng được trong phạm vi giới hạn nồng độ ứng với đoạn thẳng của đường biểu diễn, bởi vì trong giới hạn này mới có sự tuyến tính giữa mật độ quang và nồng độ dung dịch. Sau đó có thể xác định nồng độ của dung dịch mẫu cần tìm bằng cách đo giá trị D_x rồi chiếu lên đồ thị để tìm giá trị C_x như trên hình 2.38, tuy nhiên cần chú ý là nồng độ C_x phải pha làm sao nằm trong giới hạn tuyến tính của đường chuẩn.



Hình 2.37 Đồ thị đường chuẩn E_λ-C%.



Hình 2.38 Đồ thị tính D_λ theo phương pháp đường nền.

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 10003 TRẦN HƯNG ĐẠO QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Phương pháp phổ hồng ngoại cũng có thể áp dụng để phân tích định lượng hỗn hợp chất nhưng thực hiện phức tạp hơn nhiều.

2.5. Ứng dụng của phổ quay

2.5.1. Ứng dụng trong phân tích

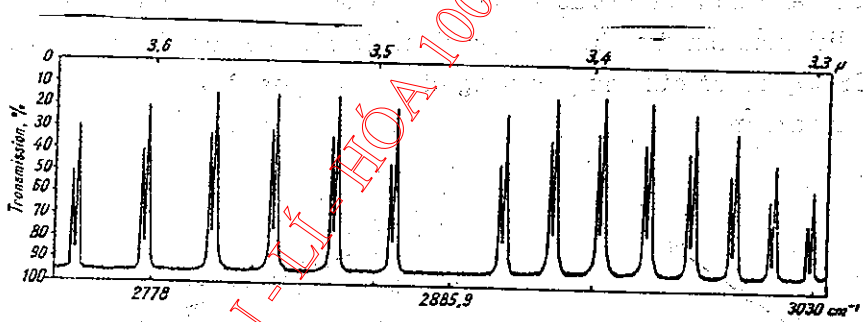
Các đỉnh hấp thụ xuất hiện trong phổ quay do phân tử quay quanh các trục quán tính khác nhau. Mỗi vạch phổ quay đều đặc trưng cho chất nghiên cứu, tuy nhiên nó không cho các đặc trưng của nhóm chức hoặc bộ khung phân tử như trong phổ hồng ngoại hoặc phổ tử ngoại.

Trong phân tích định tính để nhận biết các chất cần phải tiến hành ghi phổ quay của mẫu chất rồi so sánh phổ này với phổ trong atlat (phổ của các chất đã biết). Khi thấy có sự đồng nhất của phổ chất nghiên cứu với phổ của một chất nào đó trong atlat thì có thể xác định chất chưa biết chính là chất trong atlat đem so sánh. Do mẫu chất đo ở dạng khí dưới áp suất giảm (chỉ còn 10^{-2} tor) nên hỗn hợp chất không gây ảnh hưởng đến vạch phổ của từng chất; ví dụ phổ quay của $H^{35}Cl$ và $H^{37}Cl$ cho hai nhóm tín hiệu riêng biệt của hai chất trên cùng một phổ *(xem hình 2.39)*. Lượng mẫu chất cần rất nhỏ, chỉ 10^{-6} đến 10^{-7} mol.

Phân tích định lượng bằng phương pháp phổ quay chưa thực hiện được vì việc đo giá trị cường độ vạch phổ quay còn gặp khó khăn chưa giải quyết được.

2.5.2. Xác định khoảng cách nguyên tử

Theo phương trình tính số sóng của vạch hấp thụ *(phương trình 2.5)* có thể tìm được hằng số quay B, do đó có thể tính được momen quán tính I và khoảng cách giữa hai nguyên tử trong phân tử với độ chính xác khoảng 0,0001Å. Tuy nhiên phương pháp này chỉ áp dụng thuận lợi với phân tử gồm hai nguyên tử, còn các phân tử lớn hơn gặp nhiều khó khăn.



Hình 2.39 *Phổ quay của $H^{35}Cl$ và $H^{37}Cl$.*

Trong các phân tử thẳng có nhiều hơn hai nguyên tử và trong các phân tử không thẳng có nhiều hơn ba nguyên tử, các momen quán tính nhận được qua phổ không đủ để xác định các thông số cấu tạo. Ví dụ đối với phân tử ABCD không thẳng và không đồng phẳng cần có 6 thông số cấu tạo: 3 khoảng cách nguyên tử và 3 góc liên kết. Nhưng từ phổ chỉ nhận được 3 giá trị momen quán tính I_x, I_y và I_z. Ba phương trình độc lập còn thiếu để xác định 6 ẩn số có

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000 TRẦN HƯNG ĐẠO TP QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

thể nhận được qua sự thay thế nguyên tử trong phân tử bằng đồng vị của nó (ví dụ B→B') với điều kiện tính chất liên kết không thay đổi. Trong phân tử AB'CD cũng tìm được 3 giá trị momen quán tính I'_x, I'_y và I'_z. từ 6 giá trị momen quán tính trên có thể tính được các thông số cấu tạo về khoảng cách nguyên tử và góc liên kết.

Số lượng các đồng vị có trong phân tử phụ thuộc vào số lượng nguyên tử và tính đối xứng của phân tử.

2.5.3. Xác định momen lưỡng cực

Đặt chất nghiên cứu trong một điện trường mạnh; ở đây lưỡng cực quay được điều chỉnh theo các hướng xác định của từ trường ngoài. Sự lượng tử hoá theo hướng này dẫn đến sự phân tách các vạch phổ quay riêng rẽ thành nhiều hợp phần. Độ lớn của sự phân tách được đo như hiệu số của tần số khi có mặt và khi không có mặt của trường. Giá trị này phụ thuộc vào cường độ của trường E đặt vào và đại lượng momen vĩnh cửu μ của phân tử. Từ giá trị E đã biết có thể tính được momen lưỡng cực μ với sai số ±1%.

2.5.4. Ví dụ tính momen quán tính và chiều dài liên kết phân tử

Phổ quay của khí CO cho các đỉnh hấp thụ ν_1 = 115 GHz (J = 0→1), ν_2 = 230 BHz (J = 1→2), ν_3 = 345 GHz (J = 2→3) và ν_4 460 GHz (J = 3→4). Tính a) momen quán tính của phân tử CO, b) chiều dài liên kết CO.

Giải:

a) Theo phương trình (2.2) có:

$$E_q = h\nu = \frac{h^2}{8\pi^2 I} J(J+1)$$

Khi J = 1 có $\nu = \frac{h^2}{8\pi^2 I} 1(1+1) = \frac{h}{4\pi^2 I} = 115\text{GHz}$

Tính ra: $I = \frac{h^2}{4\pi^2 \times 115} = 1{,}45 \times 10^{-39}\ \text{g.cm}^2$

Tương tự, tính được I khi J = 2, 3 và 4.

b) Theo phương trình (2.1), có $I = mr^2$

$$M = \frac{m_c\ m_o}{m_c + m_o} = \frac{12 \times 15{,}99}{12 + 15{,}99} \frac{1}{6{,}02 \times 10^{23}}\ \text{g/mol}$$

$$= 1{,}14 \times 10^{-23}\ \text{g}$$

$$r^2 = \frac{I}{M} = \frac{1{,}45 \times 10^{-39}\ \text{g.cm}^2}{1{,}14 \times 10^{-23}\ \text{g}} = 1{,}27 \times 10^{-16}\ \text{cm}^2$$

$$r = \sqrt{1{,}27 \times 10^{-16}\ \text{cm}^2} = 1{,}13 \times 10^{-8}\ \text{cm} = 1{,}13\ \text{Å}$$

DIỄN ĐÀN TOÁN LÝ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Chương 3

PHƯƠNG PHÁP PHỔ TỬ NGOẠI VÀ KHẢ KIẾN

Phổ tử ngoại và khả kiến, viết tắt là UV-VIS (Utraviolet-Visible) là phương pháp phân tích được sử dụng rộng rãi từ lâu.

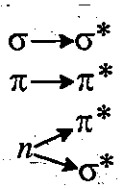
Phổ tử ngoại và khả kiến của các hợp chất hữu cơ gắn liền với bước chuyển electron giữa các mức năng lượng electron trong phân tử khi các electron chuyển từ các obitan liên kết hoặc không liên kết lên các obitan phản liên kết có mức năng lượng cao hơn, đòi hỏi phải hấp thụ năng lượng từ ngoài.

Các electron nằm ở obitan liên kết σ nhảy lên obitan phản liên kết σ* có mức năng lượng cao nhất, ứng với bước sóng 120-150 nm, nằm ở vùng tử ngoại xa. Các electron π và các electron *p* (cặp electron tự do) nhảy lên obitan phản liên kết π* có mức năng lượng lớn hơn, ứng với bước sóng nằm trong vùng tử ngoại (200-400nm) hay vùng khả kiến (400-800nm) tùy theo mạch liên hợp của phân tử.

3.1. Cơ sở lí thuyết

3.1.1. Bước chuyển dời năng lượng

Ở điều kiện bình thường, các electron trong phân tử nằm ở trạng thái cơ bản, khi có ánh sáng kích thích với tần số ν thích hợp thì các electron này sẽ hấp thụ năng lượng và chuyển lên các trạng thái kích thích có mức năng lượng cao hơn. Theo cơ học lượng tử, ở trạng thái cơ bản các electron được sắp đầy vào các obitan liên kết σ, π hay n có mức năng lượng thấp, khi bị kích thích sẽ chuyển lên các mức năng lượng cao hơn:



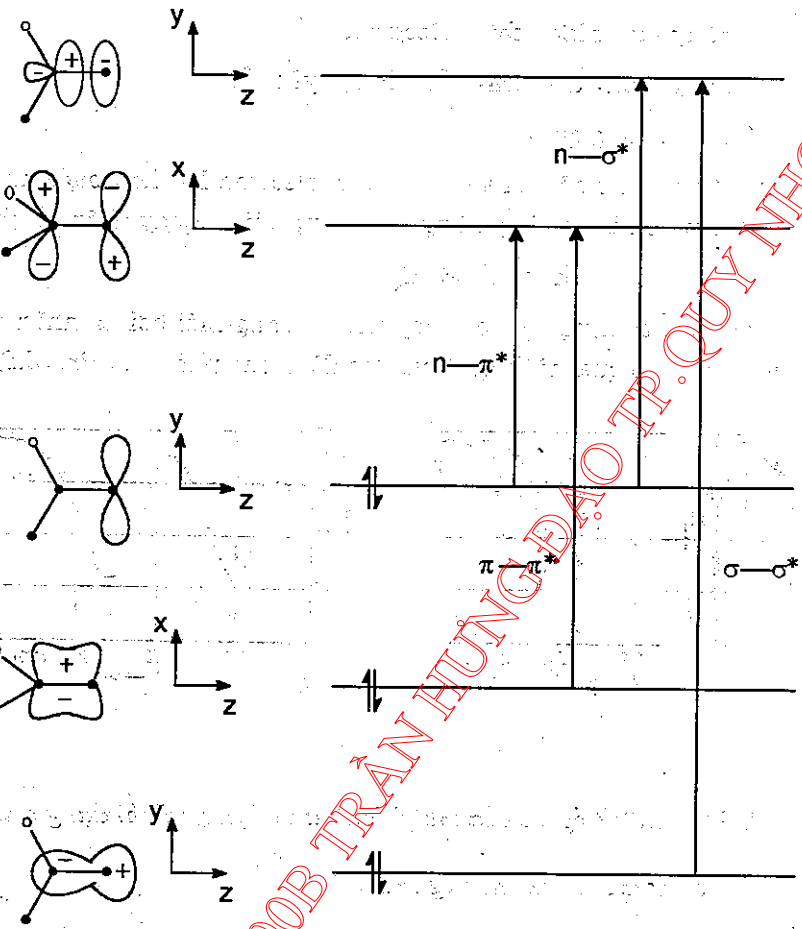
***Hình 3.1** Chỉ ra các bước chuyển dời năng lượng của các electron.*

Hiệu số mức năng lượng giữa hai obitan chính là năng lượng hấp thụ từ nguồn sáng kích thích bên ngoài.

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM



Hình 3.1 Sơ đồ bước chuyển năng lượng của các electron.

Hiệu số giữa các mức năng lượng này khác nhau. Vì

$$\Delta E = h\nu = \frac{hc}{\lambda}$$

do đó chiều dài bước sóng của các cực đại hấp thụ sẽ ngược lại:

$$\lambda_{\sigma\to\sigma^*} < \lambda_{\pi\to\pi^*} < \lambda_{n\to\sigma^*} < \lambda_{n\to\pi^*}$$

Bảng 3.1 Sự hấp thụ của các hợp chất cacbonyl.

Bước chuyển dời năng lượng	λ (nm)	Năng lượng kích thích (E, kcal/mol)
$\sigma\to\sigma^*$	120	230
$\pi\to\pi^*$	160	184
$n\to\sigma^*$	180	162
$n\to\pi^*$	280	82

Thường trong quá trình kích thích electron có kèm theo quá trình quay và dao động của phân tử, do đó năng lượng chung của hệ phân tử bằng tổng năng lượng của các quá trình trên:

$$E_{tổng\ số} = E_q + E_d + E_e$$

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

trong đó: E_e năng lượng kích thích electron,

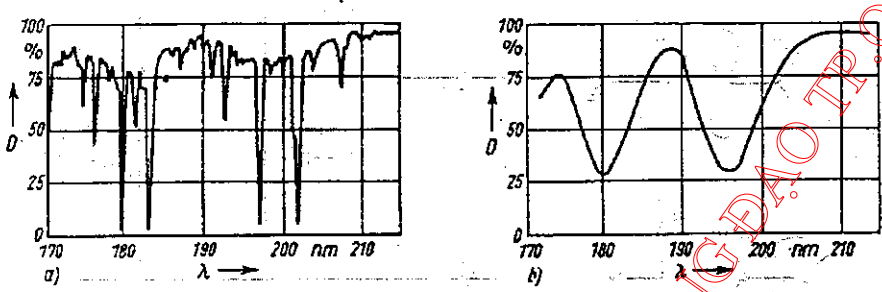
E_d năng lượng dao động của các nguyên tử,

E_q năng lượng quay.

Bước nhảy năng lượng đối với sự kích thích electron lớn hơn bước nhảy năng lượng đối với sự dao động và lớn hơn bước nhảy năng lượng ứng với sự quay phân tử nhiều:

$$E_e >> E_d >> E_q$$

Do đó khi ghi phổ tử ngoại của các hợp chất ở trạng thái hơi, ta nhận được phổ với nhiều đỉnh tinh vi đặc trưng cho quá trình quay và dao động của phân tử *(hình 3.2)*.



Hình 3.2 Phổ tử ngoại của metyl iodua: a) dạng hơi; b) dạng dung dịch.

3.1.2. Sự liên hợp của các nhóm mang mầu

Từ lâu người ta thấy rằng các chất có mầu là do trong phân tử có chứa nhiều nhóm nối đôi hay nối ba như C=C, C=O, C=N, N=N, C≡C, N≡N, NO_2,... do vậy các nhóm này được gọi là nhóm mang mầu. Nếu như có nhiều nhóm mang mầu liên hợp với nhau thì mầu của chúng càng đậm. Các chất có chứa nhiều nhóm liên hợp có mầu đậm thì cực đại hấp thụ chuyển dịch về phía sóng dài. Có các kiểu liên hợp sau:

Liên hợp π-π

Loại này xuất hiện khi trong hợp chất có chứa các nối đôi liên hợp, các cực đại hấp thụ chuyển dịch mạnh về phía sóng dài và cường độ hấp thụ tăng khi số nối đôi liên hợp tăng *(bảng 3.2)*.

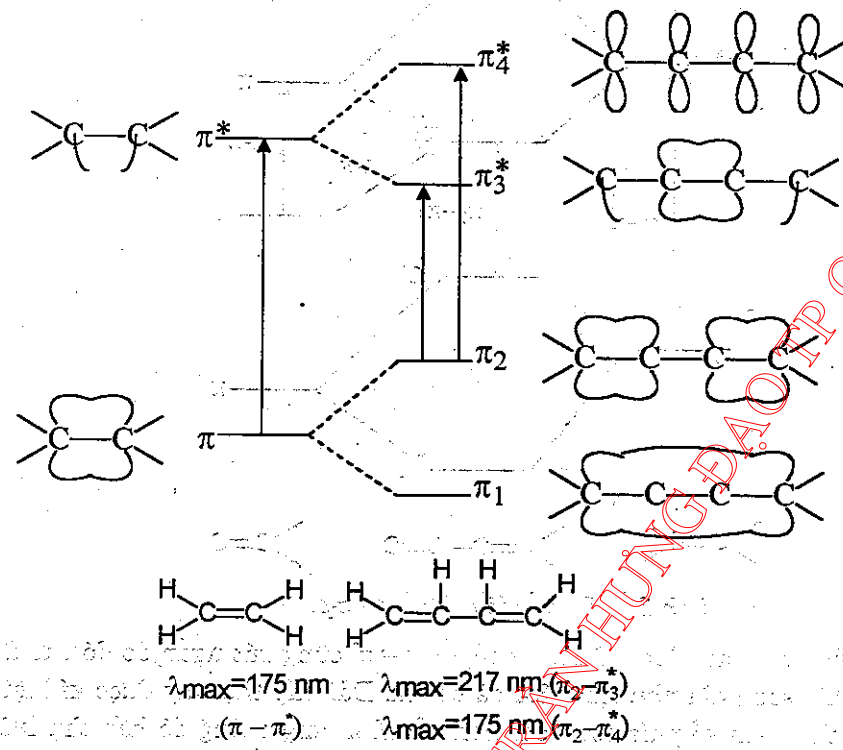
Bảng 3.2 Cực đại hấp thụ của polien CH_3-$(CH=CH)_n$-CH_3.

n	λmax (nm)	εmax
1	174	24000
2	227	24000
3	275	30000
4	310	76500
5	342	122000

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÝ - HÓA 100 B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM



***Hình 3.3** Sơ đồ kiểu liên hợp π-π.*

Nguyên nhân của sự thay đổi này là do sự liên hợp giữa các liên kết π đã làm thay đổi mức năng lượng của các obitan, rút ngắn hiệu số năng lượng của bước chuyển electron như đã chỉ ra trong hình 3.3.

Dải hấp thụ này kí hiệu là K. Dải K nằm về phía sóng ngắn nhưng cường độ hấp thụ lớn ($\varepsilon \sim 10^4$).

Đối với vòng benzen, còn xuất hiện dải hấp thụ ứng với bước chuyển dời của hệ thống electron có bước sóng 256 nm được gọi là dải B.

Liên hợp π-p

Đây là sự liên hợp của nối đôi và cặp electron tự do ở các dị tố trong các liên kết đôi C=Z (Z=O,N,S,...) và C-X (X=Cl, Br, I,...) tương ứng với bước chuyển electron $n \rightarrow \pi^*$. Sự liên hợp này dẫn đến sự chuyển dịch cực đại về phía sóng dài nhưng cường độ hấp thụ không tăng *(xem bảng 3.3)*.

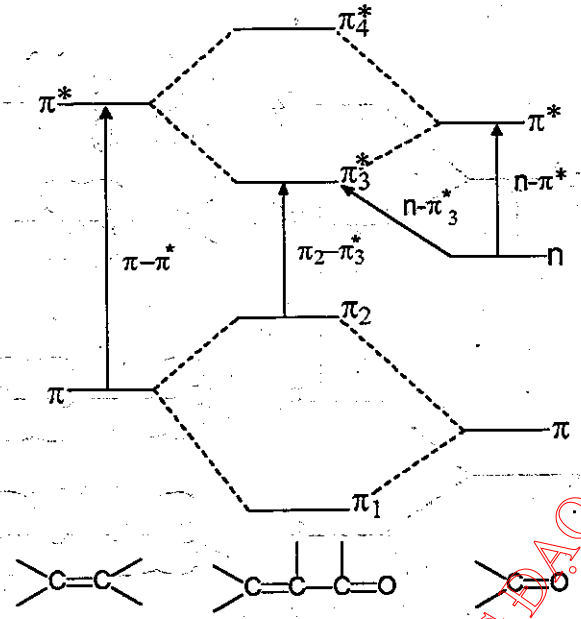
***Bảng 3.3** Cực đại hấp thụ tương ứng với liên hợp π - p.*

	λ_{max}	ε_{max}
C=C	160	10000
CH_3O-C=C	190	10000
benzen (dải K)	204	7400
clobenzen	210	7400

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP.QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

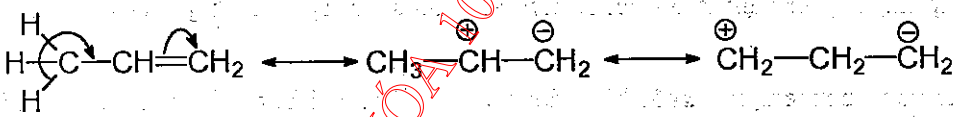


***Hình 3.4** Sơ đồ kiểu liên hợp π-p.*

Khi mạch liên hợp π-π tăng lên thì bước chuyển n→π* cũng rút ngắn, do đó cực đại hấp thụ chuyển dịch về phía sóng dài như hình 3.4 đã chỉ ra. Dải hấp thụ này được kí hiệu là R. Dải R có cực đại hấp thụ nằm về phía sóng dài hơn dải K nhưng cường độ hấp thụ luôn nhỏ hơn (ε~100).

Liên hợp π-σ

Nhóm ankyl thế ở liên kết π gây ra hiệu ứng siêu liên hợp, các electron trong phân tử chuyển dịch theo sơ đồ sau:



Hiệu ứng này làm cực đại hấp thụ chuyển dịch về phía sóng dài một ít *(xem bảng 3.4)*.

***Bảng 3.4** Cực đại hấp thụ tương ứng với liên hợp π - σ*

Hợp chất	λ_{max}	ε_{max}
$CH_2=CH_2$	165	16000
$(CH_3)_2C=C(CH_3)_2$	196,5	
$CH_2=CH-CH=CH_2$	217	21000
$CH_3-CH=CH-CH=CH_2$	223	24000
$CH_3-CH=CH-CH=CH-CH_3$	227	24000

3.1.3. Nguyên lí Franck - Condon

Như trên đã xét, mỗi bước chuyển electron đều kèm theo bước chuyển dao động và các bước chuyển này đều tuân theo quy luật lựa chọn, gọi là nguyên lí Franck-Condon. Vì bước chuyển từ một trạng thái electron này sang một trạng thái khác xảy ra rất nhanh (10^{-16} s),

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÝ - HÓA 10000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

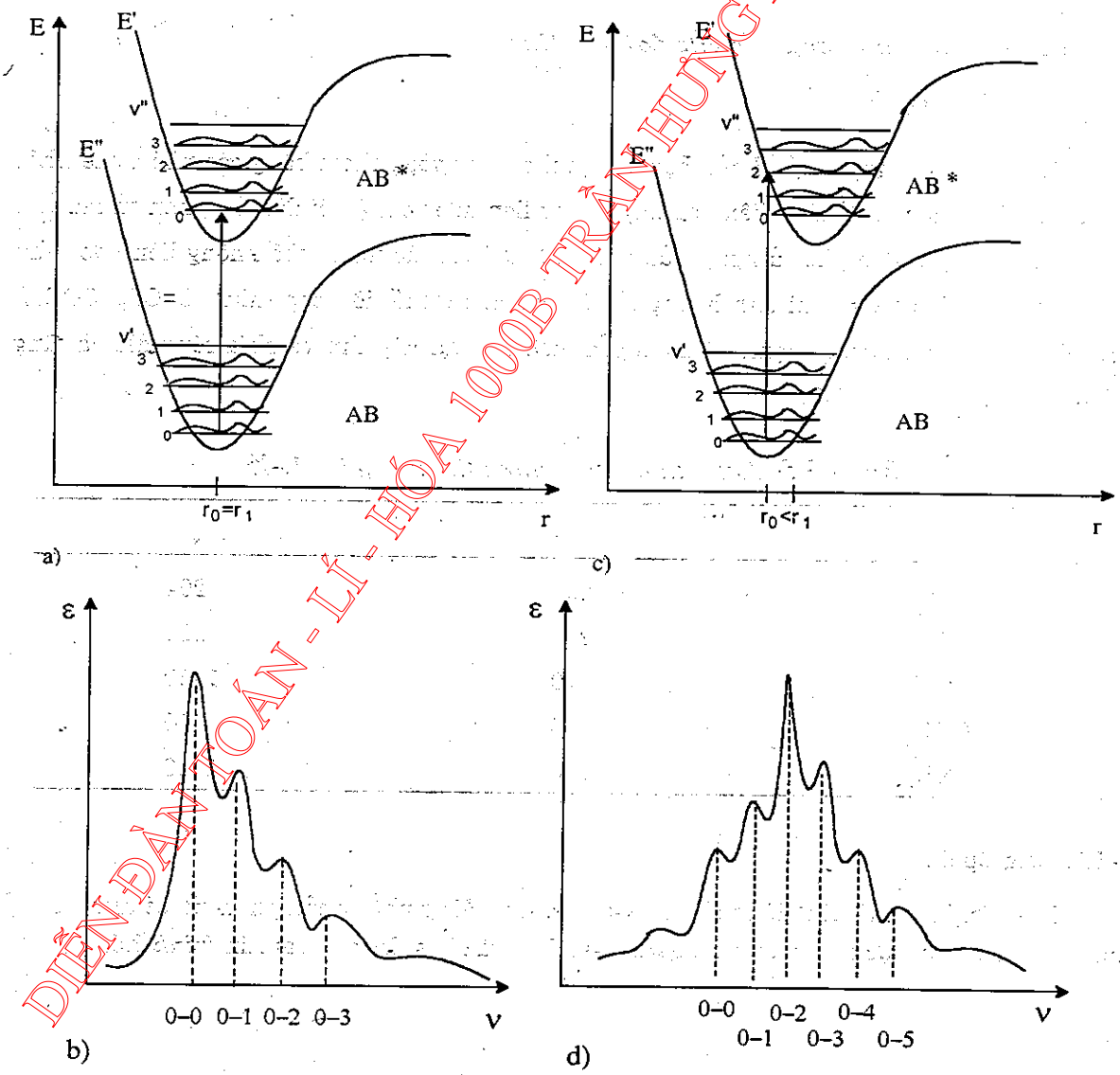
WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

trong khi đó dao động hạt nhân xảy ra chậm hơn (10^{-12} s) nên khoảng cách hạt nhân hầu như không thay đổi trong khoảng thời gian chuyển electron này.

Theo nguyên lí Franck-Condon thì ở trong sự kích thích electron rất nhanh, bước chuyển giữa các trạng thái dao động nào không làm thay đổi khoảng cách hạt nhân sẽ có xác suất lớn nhất.

Người ta phân biệt 2 trường hợp.

(1) Khi phân tử bị kích thích electron, khoảng cách cân bằng giữa các nguyên tử không đổi ($r_1 = r_o$), đường cong thế năng ở trạng thái electron cơ bản và trạng thái electron bị kích thích không bị lệch nhau đối với khoảng cách r. Bước chuyển dao động v' = 0 sang v'' = 0 có xác suất lớn nhất. Xác suất này sẽ bị giảm đi với sự tăng v''. Do đó bước chuyển v' = 0→ v'' = 0, trong cấu trúc dao động của phổ tử ngoại có cường độ lớn nhất, còn các đỉnh khác có cường độ nhỏ hơn. Đường phổ có cấu trúc bất đối xứng *(hình 3.5a, b)*. Ví dụ đặc trưng cho loại phổ này là phổ tử ngoại của naphtalen *(hình 3.15)*



Hình 3.5 *Bước chuyển electron theo nguyên lí Frank-Condon.*

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

(2) Khi phân tử bị kích thích electron thì khoảng cách cân bằng giữa các nguyên tử lớn lên ($r_1 > r_o$), đường cong thế năng ở trạng thái kích thích bị chuyển dịch so với trạng thái cơ bản. Bước chuyển dao động từ trạng thái dao động cơ bản v'=0 lên trạng thái dao động cơ bản v"=0 ở mức kích thích electron không phải có xác suất lớn nhất. Trái lại, do sự chuyển dịch của đường cong thế năng ở trạng thái kích thích electron cho nên bước chuyển v'=0 lên trạng thái dao động cao (ví dụ v"=2) sẽ có xác suất lớn nhất vì ở đây đảm bảo cho khoảng cách các nguyên tử không đổi. Ngoài ra bước chuyển từ v'=0 lên các mức dao động khác sẽ có xác suất nhỏ hơn *(hình 3.5c, d)*.

Do đó, đường cong hấp thụ của phổ tử ngoại có cực đại hấp thụ lớn nhất ứng với v'=0→v"=2, còn các cực đại khác đều nhỏ hơn, cấu trúc đường cong phổ là đối xứng *(hình 3.5d)*. Ví dụ đặc trưng cho loại phổ này là phổ tử ngoại của hơi benzen *(hình 3.11)*.

3.1.4. Các yếu tố ảnh hưởng đến cực đại hấp thụ

1- Hiệu ứng nhóm thế

Khi thay thế nguyên tử H của hợp chất anken hay vòng thơm bằng các nhóm thế khác nhau, tùy theo nhóm thế đó có liên hợp hay không liên hợp với hệ nối đôi của phân tử mà ảnh hưởng nhiều hay ít đến phổ tử ngoại của phân tử. Đối với các nhóm thế không liên hợp (như CH_3, CH_2OH, CH_2COOH) thì ảnh hưởng ít, còn các nhóm thế liên hợp (như $C=CR_2$, COOH, OH, NO_2,...) có ảnh hưởng mạnh, làm chuyển dịch cực đại hấp thụ về phía sóng dài và tăng cường độ hấp thụ *(bảng 3.5)*.

Bảng 3.5 Ảnh hưởng của nhóm thế trong C_6H_5-X.

X	λ_{max}	ε_{max}
H	254	204
CH_3	261	225
OH	270	1450
COOH	273	970
NH_2	280	1430

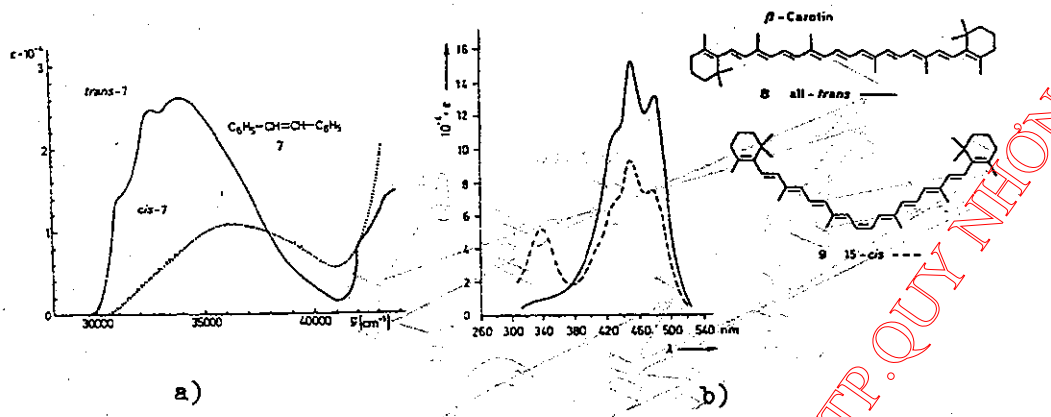
2- Hiệu ứng lập thể

Hiệu ứng lập thể như đồng phân *cis-trans*, tính đồng phẳng của phân tử có ảnh hưởng mạnh đến hấp thụ cực đại, ví dụ như ở *trans*-stilben và *cis*-stilben, β-carotin *(hình 3.6)*.

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM



Hình 3.6 Phổ tử ngoại của trans-stilben và cis-stilben, β-carotin.

3- Ảnh hưởng của dung môi

Dung môi có ảnh hưởng mạnh đến vị trí cực đại hấp thụ tùy theo độ phân cực của chúng. Ảnh hưởng này khác nhau đối với các dải hấp thụ khác nhau. Khi tăng độ phân cực của dung môi thì dải K chuyển dịch về phía sóng dài còn dải R ($n\rightarrow\pi^*$) lại chuyển dịch về phía sóng ngắn.

3.2. Kĩ thuật thực nghiệm

3.2.1. Cấu tạo của phổ kế tử ngoại và khả kiến

Phổ kế tử ngoại và khả biến thường được thiết kế đo cả vùng phổ từ 200-1000nm. Nó gồm hai loại: loại một chùm tia đo điểm và loại hai tia quét cả vùng phổ. Cả hai loại này đều gồm các bộ phận:

1- *Nguồn sáng:* dùng đèn Tungsten halogen (đo vùng 350-1000 nm) và đèn đơteri hay đèn hidro (đo vùng 200-350 nm).

2- *Bộ chọn sóng:* dùng kính lọc hoặc bộ đơn sắc. Bộ đơn sắc dùng lăng kính chế tạo bằng thạch anh hoặc cách tử (vạch từ 2000-3600 vạch/mm).

3- *Đêtectơ:* phổ biến dùng tế bào nhân quang, có độ nhạy và độ bền cao. Một số máy hiện nay dùng đêtectơ là dàn điôt (máy của hãng Hewlett Parkard) gồm 1024 điôt (HP8453) cho cả vùng tử ngoại và khả kiến.

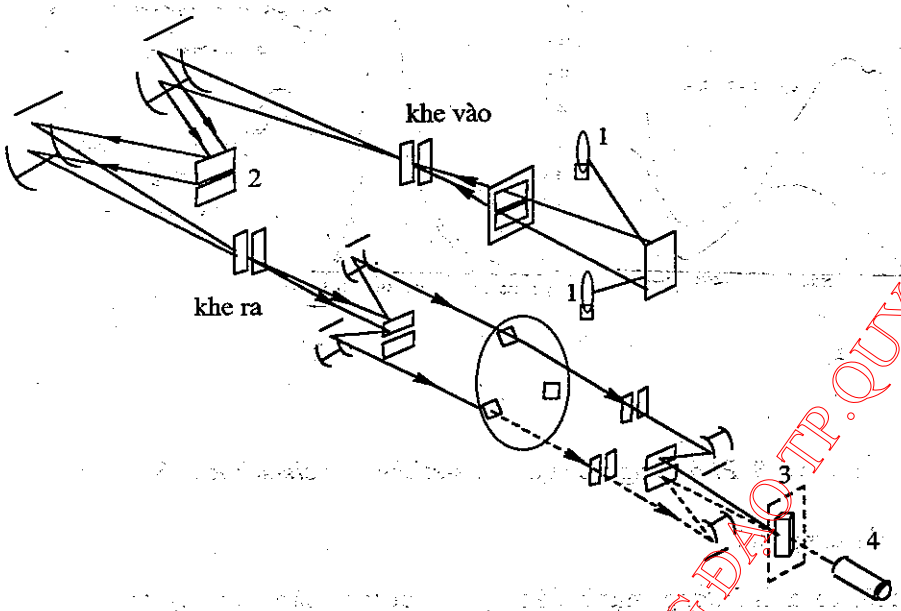
4- *Bộ phận đọc tín hiệu:* loại máy đo điểm thường có bộ phận đọc tín hiệu là đồng hồ đo điện thế hoặc bộ phận hiện số. Máy hai chùm tia dùng bộ phận tự ghi hoặc ghép nối với máy tính electron và máy in.

Trên hình 3.7 và 3.8 chỉ ra sơ đồ cấu tạo của phổ kế hai chùm tia của hãng Perkin Elmer và hãng Hewlett Parkard.

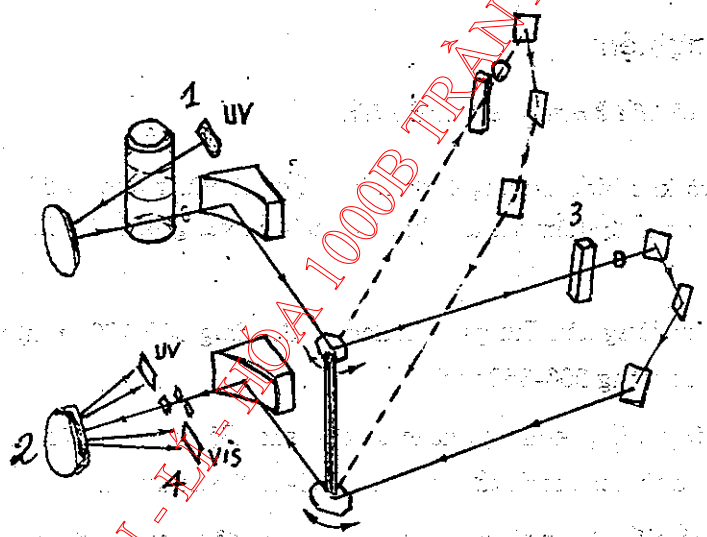
DIỄN ĐÀN TOÁN LÝ-HÓA 000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM



Hình 3.7 Sơ đồ phổ kế tử ngoại và khả kiến hai chùm tia (hãng Perkin Elmer):
1-nguồn sáng; 2-cách tử; 3-cuvet mẫu; 4-đêtectơ.



Hình 3.8 Sơ đồ phổ kế tử ngoại và khả kiến một chùm tia (hãng Hewlett Parkard):
1-nguồn sáng; 2-cách tử; 3-cuvet mẫu; 4-đêtectơ dàn điôt.

3.2.2. Phổ kế vùng cực tử ngoại

Phổ kế vùng cực tử ngoại chia làm hai loại:

1-Loại đo vùng 210-170 nm là kiểu đơn giản, các bộ phận quang học và đêtectơ được đặt trong khí quyển nitơ.

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÝ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN
https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

2-Loại đo vùng thấp hơn 170 nm, thiết bị được đặt trong chân không.

Các mẫu được đo ở dạng hơi hay dung dịch. Dung môi thường đo là hexan hay nước.

3.2.3. Dung môi đo phổ tử ngoại

Mẫu đo phổ tử ngoại có thể đo ở dạng hơi hay dung dịch đựng trong cuvet bằng thạch anh. Dung môi ghi phổ tử ngoại và khả kiến thông thường là metanol, etanol, n-pentan, n-hexan,...vì chúng không hấp thụ trong vùng tử ngoại. Các dung môi này phải có độ tinh khiết cao (loại dành riêng cho ghi phổ hay loại PA).

Bảng 3.6 Cực đại hấp thụ của một số dung môi thông thường.

Dung môi	λ_{max} (nm) (cuvet dày 10 mm)
axetonitrin	190
nước	191
xiclohexan	195
n-hexan	201
metanol	203
etanol	204
clorofom	237

3.2.4. Phương pháp ghi phổ

Phổ tử ngoại và khả kiến của các chất được đo ở dạng dung dịch, đựng trong cuvet bằng thạch anh (vùng 200-1000nm) hoặc trong cuvet bằng thủy tinh (vùng 350-1000 nm). Nồng độ dung dịch pha khoảng 10^{-4}-10^{-5} mol/l, đo trong cuvet có chiều dày 10 đến 20 mm. Tùy theo độ hấp thụ và nồng độ dung dịch mà mật độ quang thay đổi từ 0-2. Đối với các máy đo điểm (máy không quét tự động) cần phải điều chỉnh núm chương trình khe cho thích hợp với vùng chiều dài bước sóng cần đo.

3.3. Phổ tử ngoại và khả kiến của một số hợp chất hữu cơ

3.3.1.Hợp chất chứa nhóm mang mầu biệt lập

Các hợp chất hữu cơ chứa nhóm mang mầu biệt lập như C=C, C≡C, C=N, C=O, NO_2, NH_2,...cho các bước chuyển electron $\pi \rightarrow \pi^*$ nằm ở vùng nhỏ hơn 190 nm ($\varepsilon = 10^4$) và $n \rightarrow \pi^*$ nhỏ hơn 300 nm ($\varepsilon = 10 - 10^2$) *(xem bảng 3.7)*.

Bảng 3.7 Phổ tử ngoại của một số nhóm mang mầu biệt lập.

Nhóm	Hợp chất	Bước chuyển	λ_{max}	$\log\varepsilon_{max}$	Dung môi
C=C	$CH_2=CH_2$	$\pi \rightarrow \pi^*$	162,5	4,2	heptan
C=O	$(CH_3)_2C=O$	$n \rightarrow \pi^*$	279	1,2	heptan
		$\pi \rightarrow \pi^*$	188	3,3	
C=N	$(CH_3)_2C=N-OH$	$\pi \rightarrow \pi^*$	193		etanol
C≡C	H-C≡C-H	$\pi \rightarrow \pi^*$	173	3,8	dạng khí
C-Cl	CH_3Cl	$n \rightarrow \pi^*$	173	2,3	hexan

DIỄN ĐÀN TOÁN LÍ - HÓA 100B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Các hợp chất polien CH_3-(CH=CH)$_n$-CH_3 cho hấp thụ cực đại ứng với bước chuyển $\pi \rightarrow \pi^*$ nằm trong vùng từ 200-400 nm tùy theo mạch liên hợp dài hay ngắn và các nhóm thế khác nhau có mặt trong phân tử. Đặc điểm của bước chuyển này là có cường độ hấp thụ lớn. Cấu trúc không gian có ảnh hưởng đến vị trí đỉnh hấp thụ *(xem bảng 3.8)*.

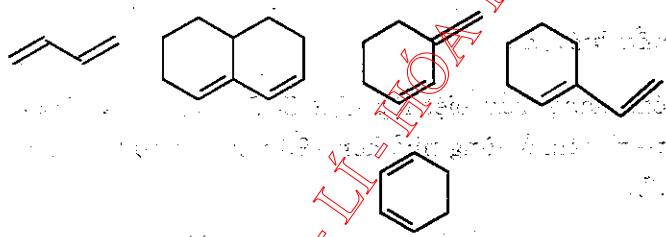
***Bảng 3.8** Hấp thụ cực đại của nhóm polien.*

Hợp chất	λ_{max}	$\log\varepsilon_{max}$
CH_2=CH-CH=CH_2	217	4,3
CH_2=CR-CH=CH_2	220	4,3
RCH=CH-CH=CH_2	223	4,4
CH_2=CR-CR=CH_2	226	4,3
RCH=CH-CH=CHR	227	4,4
	237	3,9
	247	4,3
CH_3-(CH=CH)$_3$-CH_3 *trans*	275	4,5
CH_3-(CH=CH)$_4$-CH_3 *trans*	310	4,9
CH_3-(CH=CH)$_5$-CH_3 *trans*	341	5,1

Về mặt thực nghiệm, người ta có thể tính được cực đại hấp thụ của các polien theo bảng 3.9.

***Bảng 3.9** Bảng thực nghiệm tính λ_{max} cho polien (Qui luật Woodward).*

$\lambda_{max}=\lambda_0+$gia số



λ_0=214 nm

λ_0=253 nm

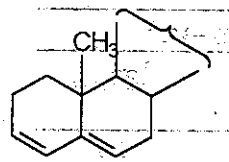
	gia số (nm)
Nối đôi liên hợp	30
Nối đôi ngoại vòng	5
Nhóm thế gốc	5
Nhóm thế trợ mầu:	
-O-ankyl	6
-O-axyl	0
-S-ankyl	30
-Cl,-Br	5
-N(ankyl)$_2$	60

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 100B TRẦN HƯNG ĐẠO TP QUY NHƠN

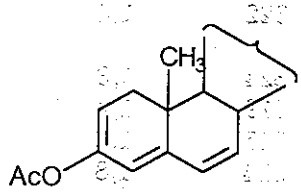
https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Ví dụ:



tính: 234 nm =(214+3.5+5) nm
tìm: 234 nm (lgε=4,3)
$\Delta^{3,5}$-Cholestadien



tính: 303 nm =(253+3.5+5+30) nm
tìm: 303 nm (lgε=4,2)
$\Delta^{4,6,22}$-Ergostatrien-3-on Enol axetat

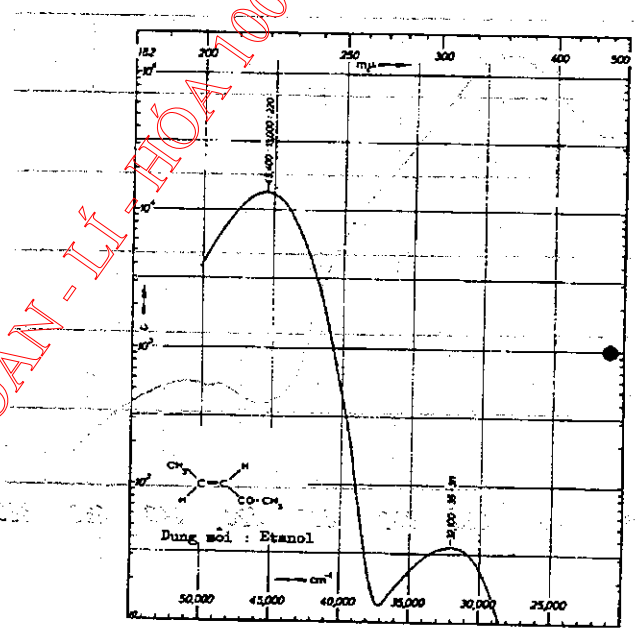
3.3.3. Hợp chất cacbonyl α,β-không no C=C-C=O

Các hợp chất cacbonyl α,β-không no có mạch liên hợp trong phân tử, có các bước chuyển $\pi \rightarrow \pi^*$ nằm trong vùng 250-400 nm (ε 10^4) và bước chuyển $n \rightarrow \pi^*$ nằm trong vùng lớn hơn 300 nm (ε 100) *(bảng 3.10)*.

Hình 3.9 chỉ ra phổ tử ngoại của *trans*-penten-3-on-2, cho hai đỉnh hấp thụ ở 220 nm ($\pi \rightarrow \pi^*$) và 311 nm ($n \rightarrow \pi^*$).

Hình 3.10 chỉ ra phổ tử ngoại của benzophenon trong dung môi xiclohexan (không phân cực) và trong etanol (phân cực). Trong dung môi phân cực thì cực đại $\pi \rightarrow \pi^*$ chuyển dịch về phía sóng dài, còn cực đại $n \rightarrow \pi^*$ chuyển dịch về phía sóng ngắn.

Vị trí cực đại hấp thụ của hợp chất cacbonyl không no có thể tính theo công thức thực nghiệm *(xem bảng 3.11)*.



***Hình 3.9** Phổ tử ngoại của trans-penten-3-on-2.*

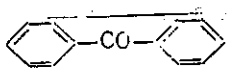
DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

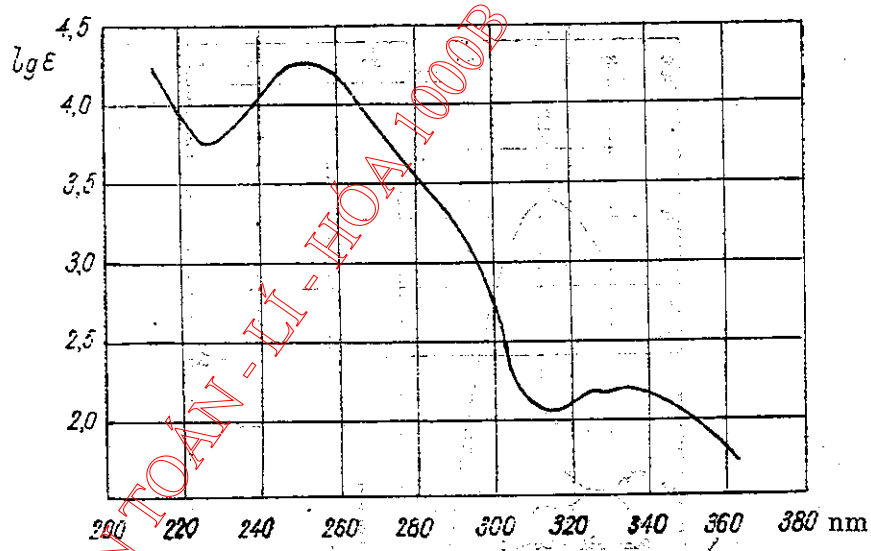
https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Bảng 3.10 *Cực đại hấp thụ của một số hợp chất cacbonyl α,β không no.*

Hợp chất	π→π*		n→π*	
	λ_{max} (nm)	$lg\varepsilon_{max}$	λ_{max} (nm)	$lg\varepsilon_{max}$
CH_2=CH-CHO	208	4,0	328	1,1
CH_3-CH=CH-CHO	220	4,2	322	1,4
CH_3-(CH=CH)$_2$-CHO	271	4,4		
CH_2=CH-CO-CH_3	212	3,5	324	1,3
CH_2=C(CH_3)-CO-CH_3	218	3,9	319	1,4
CH_3-CH=CH-CO-CH_3	224	4,0	315	1,6
(CH_3)$_2$C=CH-CO-CH_3	235	4,2	314	1,8
CH_2=CH-COOH	<200	-	306	30
CH_3-CH=CH-COOH	205	4,2		
(CH_3)$_2$C=CH-COOH	216	4,1		
(CH_3)$_2$C=C(CH_3)-COOH	221	4,0		
CH_3-(CH=CH)$_2$-COOH	254	4,4		
CH_3-(CH=CH)$_3$-COOH	294	4,6		
CH_3-(CH=CH)$_4$-COOH	327	4,7		
CH_2=CH-COOR	<200	-		
CH_3-CH=CH-COOR	205	4,2		
(CH_3)$_2$C=CH-COOR	217	4,2		
ROOC-CH=CH-COOR				
cis	205	3,9		
trans	211	4,2		





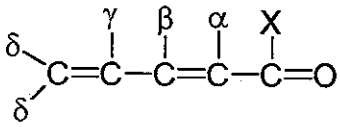
Hình 3.10 *Phổ tử ngoại của benzophenon.*

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP.QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Bảng 3.11 *Bảng tính cực đại hấp thụ của hợp chất cacbonyl không no (Quy luật Woodward).*



$\lambda_{max} = \lambda_o + \Sigma A_i$ (trong metanol hay etanol)

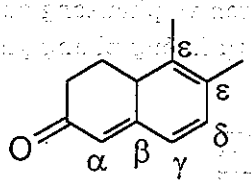
	λ_o (nm)
X=H	207
X=ankyl	215
X=OH,O-ankyl	193

	Số gia A_i (nm)
-Nối đôi kéo dài mạch	30
-Nối đôi ngoại vòng	5
-Đien đồng vòng	39

-Các nhóm thế:

	α	β	γ	δ
ankyl (vòng)	10	12	18	18
Cl	15	12		
Br	25	30		
OH	35	30		
O-ankyl	35	30		
OAc	6	6	6	6
$N(ankyl)_2$		95		

Ví dụ:



giá trị cơ bản	215
2 nối đôi liên hợp	60
1 nối đôi ngoại vòng	5
dien đồng vòng	39
ankyl	18
2 x ankyl	36
	385 nm

Thực nghiệm đo: 388 nm

3.3.4. Hệ vòng thơm benzen

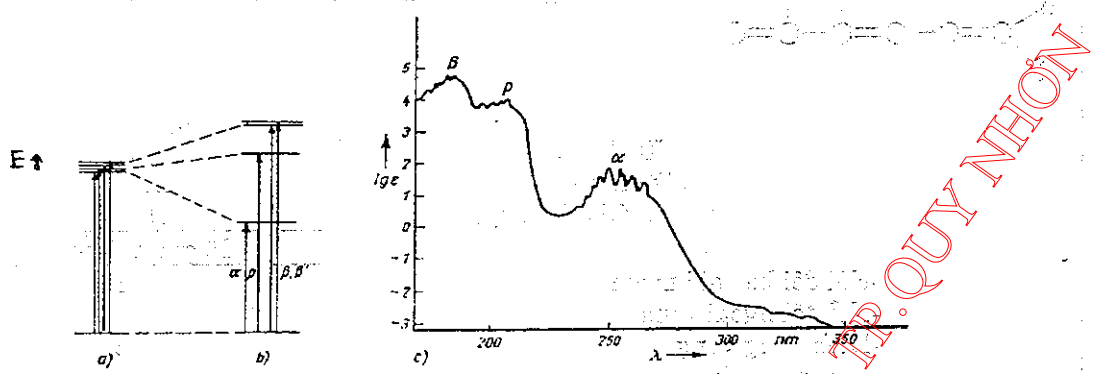
Benzen ở dạng hơi ứng với bước chuyển electron $\pi \rightarrow \pi^*$ cho 3 dải hấp thụ ở 184 nm (ε 46000), dải K ở 202 nm (ε 7400) và dải B ở 254 nm (ε 204) *(hình 3.11)*, dải B cho các đỉnh tinh vi đặc trưng cho vòng benzen.

	λ_{max} (nm)	ε_{max} (l/mol.cm)
β	180-185	4.10^4
p	195-205	5.10^3
α	230-270	200
-	>330	1

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 10003 TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

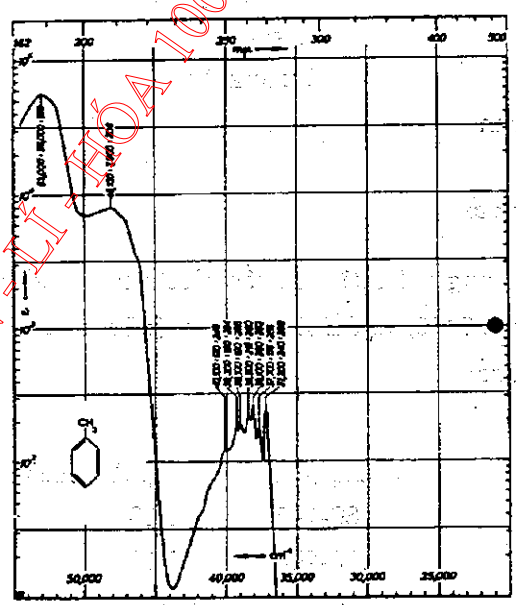
WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM



Hình 3.11 Phổ tử ngoại của benzen ở dạng hơi.

Khi có mặt nhóm thế trong phân tử vị trí cực đại hấp thụ có thể thay đổi khác nhau. Nếu nhóm thế là gốc ankyl thì cực đại chuyển dịch ít và dạng phổ ít thay đổi, nhưng nhóm thế là liên hợp (CHO, COOH, OH, NH_2,...) thì cực đại chuyển dịch về phía sóng dài và mất đi các đỉnh tinh vi *(hình 3.11, 3.12, 3.13 và bảng 3.12)*.

Các biphenyl và các poliphenyl khác có sự chuyển dịch electron về phía sóng dài khi số vòng benzen tăng lên, riêng biphenyl không khác benzen vì phân tử không phẳng phá vỡ sự liên hợp.

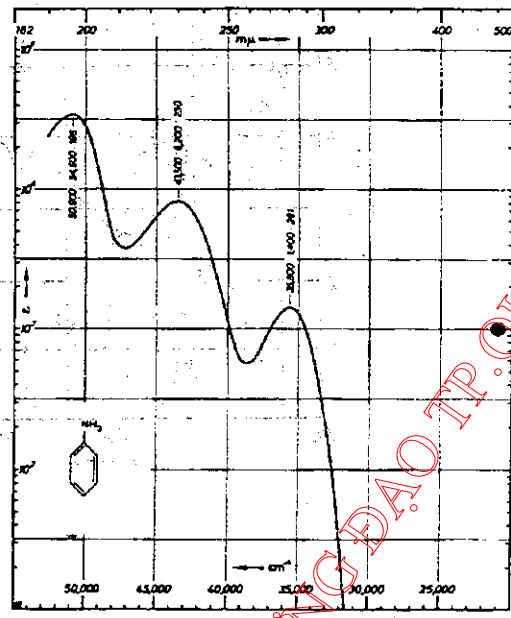


Hình 3.12 Phổ tử ngoại của toluen trong hexan.

DIỄN ĐÀN TOÁN LÍ HÓA 1000 TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

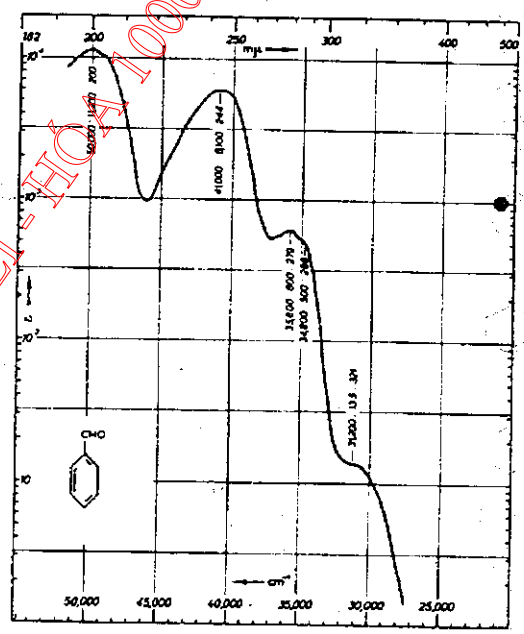
https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM



Hình 3.13 Phổ tử ngoại của anilin trong dung dịch đệm photphat (pH 8,0).

Các hiđrocacbon vòng ngưng tụ như naphtalen, antraxen, phenantren cho hấp thụ ở 3 vùng chính β , ρ và α ở phía sóng dài hơn benzen. Khi số vòng thơm tăng lên thì dải ρ chuyển về phía sóng dài nhanh nhất rồi đến dải β và cuối cùng là dải α *(hình 3.15)*.



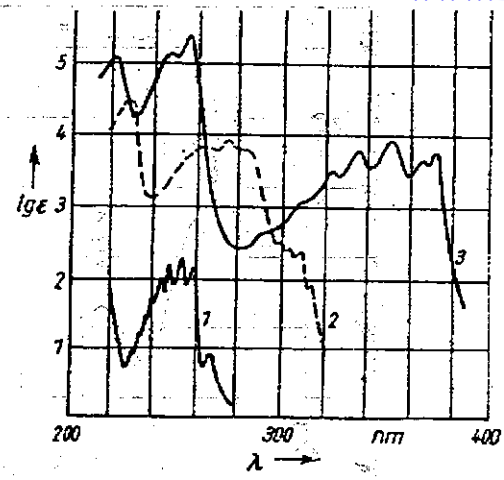
Hình 3.14 Phổ tử ngoại của benzandehit trong metanol.

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000 TÀI LIỆU ĐÀO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org

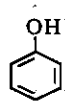
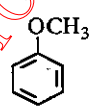
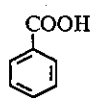
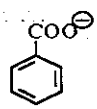
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM



Hình 3.15 *Phổ tử ngoại của benzen (1), naphtalen (2) và antraxen (3).*

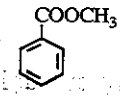
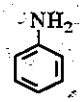
Bảng 3.12 *Phổ tử ngoại của hệ vòng thơm benzen và vòng ngưng tụ.*

Hợp chất	λ_{max} (nm) (lgε)
	255(2,5)
	262(2,3)
	264(2,3)
	261(3,8); 333(2,3)
	275(3,7)
	290(3,5)
	272(3,3)
	271(2,9); 279(2,7)
	262(2,8); 269(2,8)

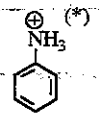
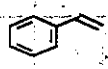
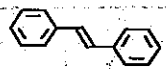
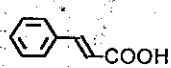
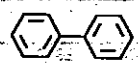
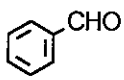
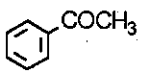
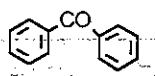
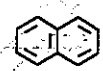
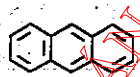
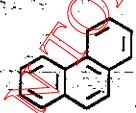
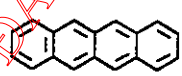
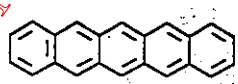
DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP.QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

	273(3,0); 280(2,9)
	284(3,2)

***Bảng 3.12** Phổ tử ngoại của hệ vòng thơm benzen và vòng ngưng tụ.*

Hợp chất	λ_{max} (nm) (lgε)
	253(2,2)
	275(3,1); 286(3,0); 297(2,8)
	295(4,4)
	267(4,3)
	250(4,2)
	278(3,0); 320(1,7)
	280(3,2); 317(1,8)
	252(4,3); 330(2,3)
	275(3,8); 319(1;0)
	252(5,3); 301(3,1); 335(3,5; 338(3,7)
	245(4,6); 251(4,7); 259(4,5); 274(4,1); 282(3,8); 293(4,0); 300(3,5); 338(2,5); 375(2,3)
	264(5,0); 274(5,5); 293(4,4); 373(3,0); 393(3,4); 415(3,7); 441(3,9); 471(4,0)
	310(5,5); 333(3,8); 373(2,4); 373(2,4); 419(2,7); 465(3,0); 490(3,5); 534(3,9); 580(4,1)

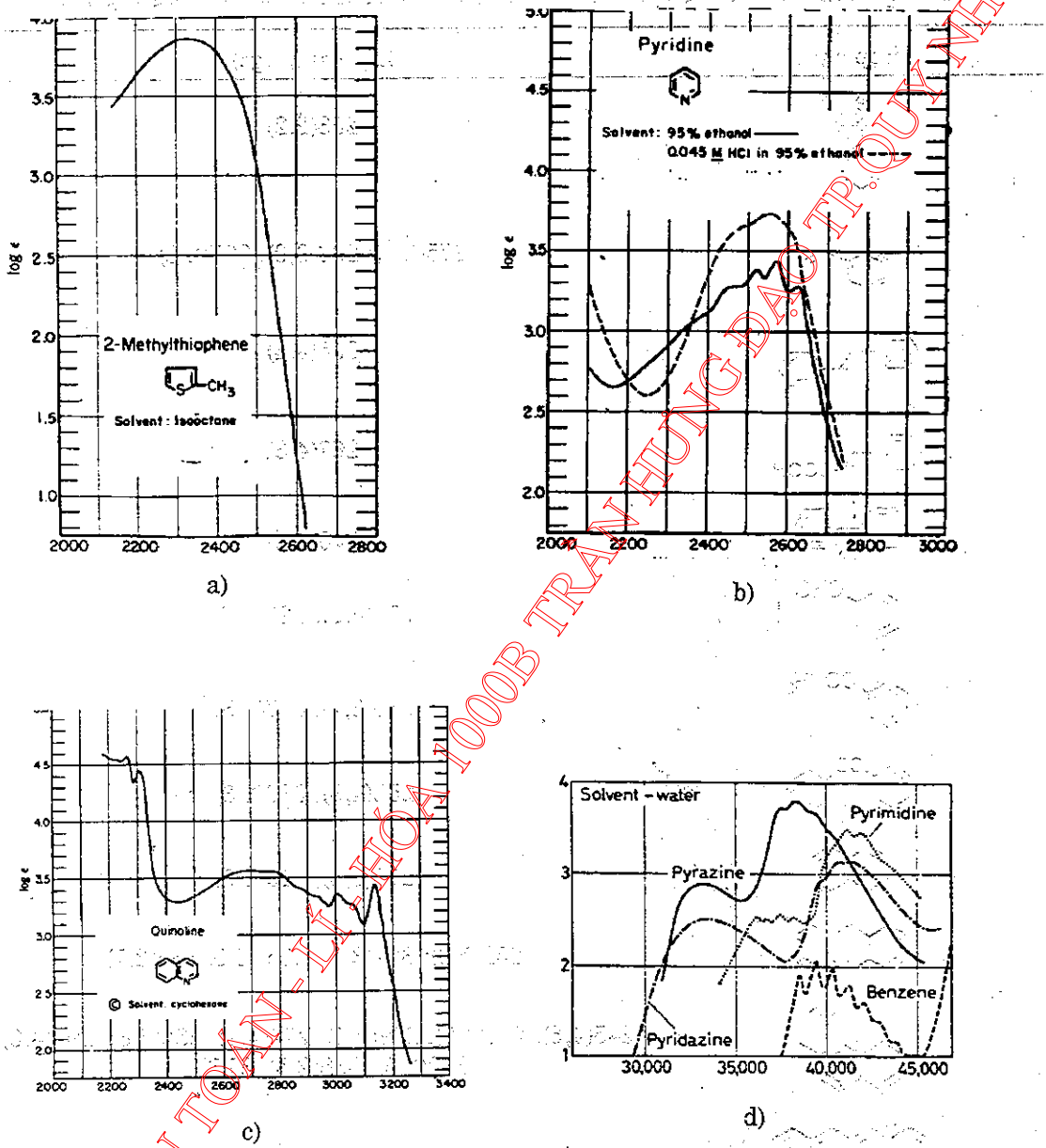
(*) trong HCl 0,1N

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Các dị vòng thơm chứa N, O, S 5 cạnh và 6 cạnh cho hấp thụ cực đại tương ứng với các bước chuyển electron $\pi \rightarrow \pi^*$ và $n \rightarrow \pi^*$. dị vòng thiophen, furan và pirol cho hấp thụ cực đại ở 210-220 nm. Dị vòng piridin cho phổ hấp thụ rất giống benzen, chứng tỏ đặc tính thơm của vòng piridin rất gần với benzen *(hình 3.16 và bảng 3.13)*.



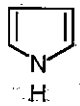
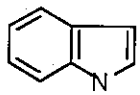
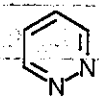
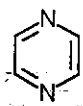
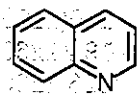
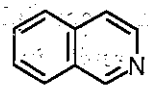
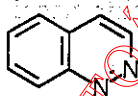
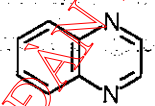
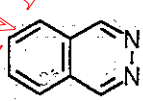
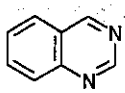
Hình 3.16 *Phổ tử ngoại của một số hợp chất dị vòng:*
(a) 2-metylthiophen, (b) Piriđin, (c) Quinolin,
(d) benzen (---), Piriđazin (-·-), Pirimiđin (....), Pirazin (__).

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP.QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Bảng 3.13 Phổ tử ngoại của một số hợp chất dị vòng.

Hợp chất	λ_{max} (nm) ($lg\varepsilon_{max}$)
	<210
	251(3,8); 231(3,9)
	<220
	218(4,4); 271(3,8); 278(3,8); 287(3,7)
	235(3,0); 239(3,1); 246(3,3); 250(3,3); 257(3,4); 263(3,3)
	243(3,2); 248(3,2); 311(2,5)
	243(3,5); 280(2,6)
	256(3,7); 260(3,7); 266 s (3,6); 311(2,8); 316(2,8)
	228(4,4); 232(4,4); 275(3,5); 305(3,4); 315(3,4)
	217(4,7); 248 s (3,3); 258(3,5); 265(2,5); 280(3,3); 295(3,1); 300(3,2); 305(3,3); 315(3,3); 320(3,5)
	276(3,5); 286(3,4); 309(3,3); 317(3,2); 323(3,3); 390(2,4)
	230(4,5); 305(3,7); 315(3,8); 350(2,8); 355(2,7); 360(2,6); 370(2,3); 380(1,9)
	250 s (3,5); 260(3,6); 270 s (3,5); 275 s (3,2); 292(2,9); 298(2,9); 305(2,9); 360(1,8); 385(1,3)
	260(3,3); 265(3,3); 280(3,2); 300(3,2); 305(3,2); 315(3,3); 335 s (2,3); 355 s (1,8); 370(1,3)

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP QUY NHƠN

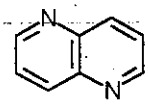
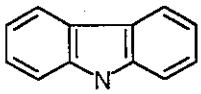
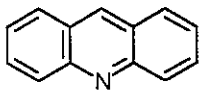
https://tieulun.hopto.org

Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú

WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

(Bảng 3.13- tiếp theo)

	235(3,8); 295(3,5)
	234(4,6); 245(4,4); 257(4,3); 293(4,2); 324(3,5); 337(3,5)
	250(5,4); 344(3,9); 355(4,0); 385 s (3,5)

(*) s - vai công

3.4. Phổ tử ngoại và khả kiến của các chất vô cơ

Các ion vô cơ cho các dải hấp thụ trong vùng tử ngoại và khả kiến do các bước chuyển $\pi \rightarrow \pi^*$, $n \rightarrow \sigma^*$ và $n \rightarrow \pi^*$ như bảng 3.14.

***Bảng 3.14** Cực đại hấp thụ của một số ion vô cơ.*

Anion	$\lambda_{max}(\pi \rightarrow \pi^*)(\varepsilon)$	$\lambda_{max}(n \rightarrow \sigma^*)(\varepsilon)$	$\lambda_{max}(n \rightarrow \pi^*)(\varepsilon)$
NO_3^-	194(8800)	313(7)	
CO_3^{2-}	217		
NO_2^-	280	360	
ClO_2^-	190(10000)	260(150)	
$S_2O_3^-$	220(4000)		
MnO_4^-		520, 545	
$Cr_2O_7^{2-}$		440	
OH^-			187(5000)
Cl^-			181(10000)
Br^-			190(11000)
			194(12600)
I^-			226(12000)

Các ion kim loại chuyển tiếp như Mn, Fe, Co, Ni và Cu chứa obitan d cho dải hấp thụ đặc trưng trong vùng khả kiến có đặc điểm là các dải hấp thụ thường rộng *(xem hình 3.17)*.

Nguyên nhân của sự xuất hiện vạch rộng là do obitan d nằm gần phía ngoài, dễ bị tác động bởi các yếu tố bên ngoài như ảnh hưởng của dung môi.

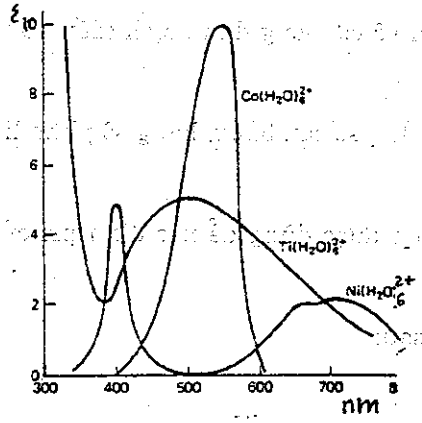
Ngược lại, các ion lantanit (La, Ce, Pr, Nd) và actinit (Ac, Th, Pa, U) chứa obitan f cho hấp thụ vùng tử ngoại và khả kiến với dải hẹp do obitan f nằm ở phía trong, ít bị ảnh hưởng tác động của dung môi *(xem hình 3.18)*.

Bước chuyển electron của ion kim loại chuyển tiếp do sự thay đổi mức năng lượng của obitan d, còn bước chuyển electron của họ lantanit và actinit do sự thay đổi mức năng lượng của obitan f. Sự thay đổi các mức năng lượng này có thể được giải thích dựa trên lí thuyết trường tinh thể.

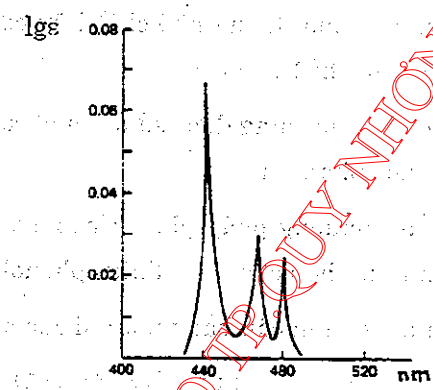
ĐỀN ĐÁP TOÁN-LÍ-HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM



Hình 3.17 Phổ hấp thụ của một số ion kim loại chuyển tiếp.



Hình 3.18 Phổ hấp thụ của praseodim clorua.

Đối với các phức của các ion kim loại chuyển tiếp thì các phối tử cũng ảnh hưởng đến vị trí hấp thụ cực đại. Theo thuyết trường tinh thể thì cường độ trường phối tử của các phối tử tăng lên theo chiều:

$I^- < Br^- < Cl^- < OH^- < C_2O_4^{2-} \sim H_2O < SCN^- < NH_3 <$ etilendiamin (en) $< NO_2^- < CN^-$

Theo chiều tăng cường độ trường phối tử này thì cực đại hấp thụ của các phức ion kim loại chuyển tiếp lại chuyển dịch về phía sóng ngắn *(xem bảng 3.15)*.

***Bảng 3.15** Hiệu ứng trường phối tử đến cực đại hấp thụ.*

Ion trung tâm	λ_{max} (nm)				
	Chiều tăng của cường độ trường phối tử →				
	$6Cl^-$	$6H_2O$	$6NH_3$	3en	$6CN^-$
Cr(III)	736	573	462	456	380
Co(III)	-	538	435	428	294
Co(II)	-	1345	980	909	-
Ni(II)	1370	1279	925	863	-
Cu(II)	-	794	663	610	-

(en= etilendiamin)

3.5. Ứng dụng của phương pháp phổ tử ngoại và khả kiến

Phương pháp phổ tử ngoại và khả kiến có ý nghĩa quan trọng trong lĩnh vực phân tích định tính, phân tích cấu trúc phân tử và phân tích định lượng. Nguyên tắc của phương pháp phân tích định lượng là dựa vào mối quan hệ giữa mật độ quang và nồng độ dung dịch theo định luật Lambert-Beer như đã trình bày ở chương "Phương pháp phổ hồng ngoại". Ưu điểm

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 100B TRẦN HƯNG ĐẠO TP QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org

Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú

WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

của phương pháp phổ tử ngoại và khả kiến trong phân tích định lượng là có độ nhạy cao, có thể phát hiện được một lượng nhỏ chất hữu cơ hoặc ion vô cơ trong dung dịch (đến 10^{-7} M): sai số tương đối nhỏ (chỉ 1 đến 3%).

Ngoài ra, nó cũng được sử dụng để xác định hằng số cân bằng, hằng số phân li và nghiên cứu động học phản ứng.

Ví dụ, phương pháp phổ tử ngoại và khả kiến được dùng để xác định pK của axit loại trung bình như hợp chất 2,4-đinitrophenol.

Phương trình cân bằng phân li của axit như sau:

$$\text{axit} + H_2O \rightleftharpoons H_3O^+ + \text{anion}$$

Mật độ quang tổng số D_t có thể viết:

$$D_t = d(\varepsilon_S[S] + \varepsilon_A[A^-]) = d.\varepsilon.C$$

ở đây s là axit, A^- là anion, ε_S và ε_A là hệ số tương ứng với dạng axit và anion trong dung dịch. Vì nồng độ $C=([S]+[A^-])$ nên có thể biến đổi phương trình trên thành:

$$\varepsilon_S[S] + \varepsilon_A[A^-] = \varepsilon([S] + [A^-]) = \varepsilon[S] + \varepsilon[A^-]$$

$$\varepsilon_S[S] - \varepsilon[S] = \varepsilon[A^-] - \varepsilon_A[A^-]$$

hay:

$$[S](\varepsilon_S - \varepsilon) = [A^-](\varepsilon - \varepsilon_A)$$

$$\frac{[S]}{[A^-]} = \frac{\varepsilon - \varepsilon_A}{\varepsilon_S - \varepsilon} \qquad (\varepsilon_S \neq \varepsilon)$$

ε_S và ε_A có thể tính được từ sự hấp thu của dung dịch pha loãng trong môi trường axit mạnh hay kiềm mạnh, khi đó nồng độ A và S nhỏ. Để xác định ε, người ta đo trong dung dịch có giá trị pH nằm trong khoảng giữa môi trường axit và kiềm nhờ hỗn hợp đệm. Trên hình 3.19 chỉ ra đồ thị đường cong hấp thụ của 2,4-đinitrophenol dưới các điều kiện khác nhau. Các đường cong hấp thụ cắt nhau ở một điểm, tại đó giá trị của ε tương ứng với S và A^- bằng nhau. Như đã biết, giá trị pH của dung dịch đệm được tính theo phương trình:

$$pK = -\log\frac{[H_3O^+][A^-]}{[S]}$$

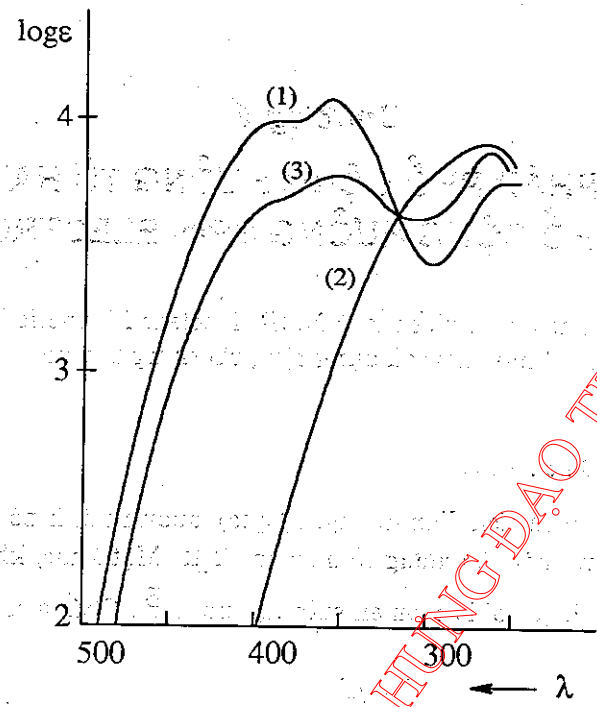
$$pK = pH + \log\frac{[S]}{[A^-]}$$

$$pK = pH + \log\frac{\varepsilon - \varepsilon_A}{\varepsilon_S - \varepsilon}$$

Từ phương trình trên tính được giá trị pK. Hợp chất 2,4-đinitrophenol có pK=4,10±0,04.

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON



Hình 3.19 Đường cong hấp thụ của 2,4-đinitrophenol: (1) trong dung dịch kiềm 0,1M; (2) trong dung dịch axit 0,1M; (3) trong dung dịch đệm pH=4,02.

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP.QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Chương 4

PHƯƠNG PHÁP PHỔ CỘNG HƯỞNG TỪ HẠT NHÂN VÀ PHỔ CỘNG HƯỞNG SPIN ELECTRON

Phổ cộng hưởng từ hạt nhân, viết tắt là NMR (Nuclear Magnetic Resonance), là phương pháp phân tích hiện đại, hiện nay được sử dụng rộng rãi trong hóa học.

4.1. Cơ sở vật lí

4.1.1. Tính chất từ của hạt nhân

Các hạt nhân nguyên tử tích điện dương, tự quay quanh mình nó sinh ra một dòng điện vòng. Dòng điện này tạo ra một từ trường có momen từ $\vec{\mu}$. Mặt khác, khi hạt nhân quay cũng sinh ra một momen quay được gọi là momen spin hạt nhân $\vec{P}$. Chúng có quan hệ với nhau qua biểu thức:

$$\vec{\mu} = \gamma \vec{P} \qquad (4.1.)$$

ở đây, γ là hằng số từ hồi chuyển (gyromagnetic) đặc trưng cho mỗi hạt nhân. Hạt nhân của mỗi đồng vị được đặc trưng bởi số lượng tử spin I có liên quan với momen từ và spin hạt nhân theo các biểu thức sau:

$$P = \sqrt{I(I+1)}\,\frac{h}{2\pi} \qquad (4.2)$$

$$\mu = \sqrt{I(I+1)}\,\frac{h}{2\pi}\gamma \qquad (4.3)$$

P và μ là modun của các vectơ $\vec{P}$ và $\vec{\mu}$ tương ứng. I có giá trị bằng $0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}$... tùy theo số khối và số thứ tự của nguyên tử.

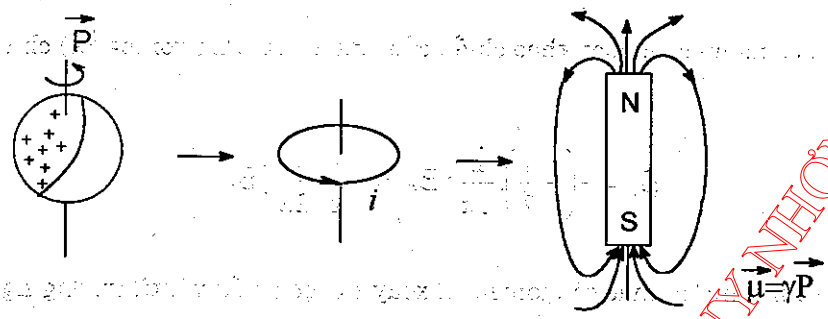
Bảng 4.1 Tính chất từ của một số hạt nhân nguyên tử.

Hạt nhân từ	Spin hạt nhân	hằng số từ hồi chuyển, 10^7 rad.T^{-1}.s^{-1}	Tần số cộng hưởng	Tỉ lệ tự nhiên (%)	Khả năng phát hiện (^{13}C=1)
^{1}H	1/2	26,751	100,000	99,98	$5,67.10^3$
^{2}H	1	4,106	15,351	0,02	$8,58.10^{-3}$
^{7}Li	3/2	10,396	38,864	92,57	$1,54.10^3$
^{11}B	3/2	8,583	32,084	81,17	$7,61.10^2$
^{13}C	1/2	6,726	25,145	1,11	1
^{14}N	1	1,932	7,224	99,64	5,74
^{15}N	1/2	-2,711	10,137	0,36	$2,16.10^{-2}$
^{17}O	5/2	-3,627	13,557	0,04	$6,14.10^{-2}$
^{19}F	1/2	25,167	94,094	100,00	$4,73.10^3$
^{29}Si	1/2	-5,314	19,867	4,70	2,09
^{31}P	1/2	10,829	40,481	100,00	$3,77.10^2$
^{119}Sn	1/2	-9,971	37,291	8,58	25,2
^{195}Pt	1/2	5,571	21,414	33,80	19,1

ĐIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM



Hình 4.1 Sơ đồ momen spin hạt nhân và momen từ.

4.1.2. Tính chất của hạt nhân từ trong từ trường ngoài

Các hạt nhân có I≠0 được gọi là các hạt nhân từ. Khi đặt hạt nhân từ vào trong từ trường ngoài có cường độ từ trường B_0 thì các momen từ hạt nhân sẽ xoay theo hướng đường sức của từ trường ngoài. Sự xoay hướng này của các momen từ không phải là bất kì mà chỉ có một số vị trí nhất định trong không gian, gọi là sự lượng tử hoá. Điều kiện lượng tử hoá được đặc trưng bằng số lượng tử từ m. Số lượng tử từ m chỉ có giá trị -I,-I+1,+I,...

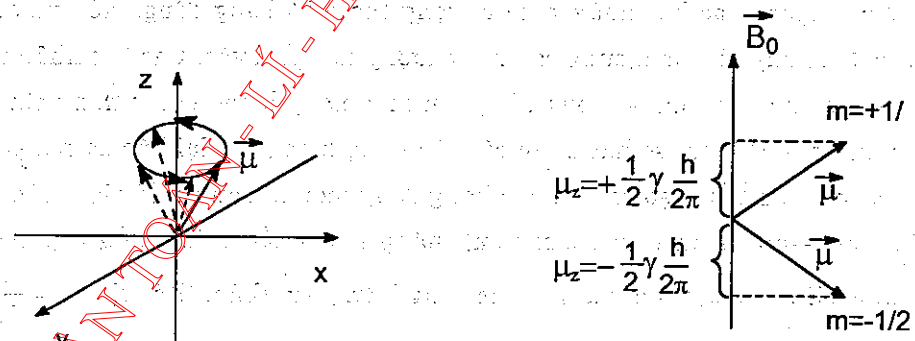
Đối với các hạt nhân ^1H, ^{13}C, ^{19}F, ^{31}P có I=½ thì m chỉ có hai giá trị là +I/2 và -I/2. Nếu gọi μ_z là hình chiếu của vectơ $\vec{\mu}$ trên trục z thì:

$$\mu_z = m\frac{h}{2\pi}\gamma \qquad (4.4)$$

vì ^1H, ^{13}C có m=±½ nên chúng chỉ có hai khả năng xoay hướng trong từ trường ngoài ứng với:

$$m = -1/2 \qquad \mu_z = -\frac{1}{2}.\frac{h}{2\pi}\gamma \qquad (4.5)$$

$$m = +1/2 \qquad \mu_z = +\frac{1}{2}.\frac{h}{2\pi}\gamma \qquad (4.6)$$



Hình 4.2 Khả năng định hướng của momen từ $\vec{\mu}$ trong từ trường ngoài.

Năng lượng của hạt nhân từ trong từ trường ngoài là:

$$E=-\mu_z.B_0 \qquad (4.7)$$

Tùy thuộc vào sự định hướng đó, hạt nhân sẽ chiếm hai mức năng lượng khác nhau. Một

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 10003 TRẦN HƯNG ĐẠO TP.QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org

Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

số hạt nhân có momen từ xoay theo chiều của từ trường (ứng với m=+½) chiếm mức năng lượng thấp:

$$E_1 = -\left(+\frac{1}{2}\right).\frac{h}{2\pi}\gamma B_0 = -\frac{1}{2}.\frac{h}{2\pi}\gamma B_0 \qquad (4.8a)$$

Một số hạt nhân khác có momen từ xoay ngược chiều với từ trường ngoài (ứng với m=-½) chiếm mức năng lượng cao:

$$E_2 = -\left(-\frac{1}{2}\right).\frac{h}{2\pi}\gamma B_0 = +\frac{1}{2}.\frac{h}{2\pi}\gamma B_0 \qquad (4.8b)$$

Hiệu số giữa hai mức năng lượng là:

$$\Delta E = E_2 - E_1 = \frac{h}{2\pi}\gamma B_0 = h\nu_0 \qquad (4.9)$$

$$\nu_0 = \frac{1}{2\pi}\gamma B_0 \qquad (4.10)$$

Tỉ lệ giữa các hạt nhân chiếm mức năng lượng cao và mức năng lượng thấp tuân theo sự phân bố Boltzmann:

$$\frac{N_1}{N_2} = e^{-\Delta E/kT} \qquad (4.11)$$

N_1 là số hạt nhân chiếm mức năng lượng thấp, N_2 là số hạt nhân chiếm mức năng lượng cao, T là nhiệt độ tuyệt đối. Ở nhiệt độ nhất định thì tỉ số giữa các hạt nằm ở hai mức năng lượng khác nhau có một gía trị nhất định. Thường tỉ số này nhỏ hơn 1. Đối với proton ^1H ở 20°C, cường độ từ trường B_0=23500 Gaus thì $\Delta E=6,6\times10^{-19}$ erg hay 0,04 J/mol và $N_1/N_2=0,99984$.

4.1.3. Điều kiện cộng hưởng

Trong từ trường ngoài, các hạt nhân nằm ở trạng thái cân bằng động. Nếu muốn phá trạng thái cân bằng động này cần phải cung cấp năng lượng từ ngoài vào. Các hạt nhân nằm ở mức năng lượng thấp sẽ hấp thụ năng lượng nhảy lên mức năng lượng cao, nhưng chỉ trong một khoảng thời gian ngắn thì một số hạt nhân có mức năng lượng cao lại bức xạ năng lượng nhảy xuống mức năng lượng thấp tạo ra một cân bằng động mới, khoảng thời gian trên gọi là thời gian phục hồi spin-spin (spin-spin relaxation), năng lượng cần thiết cung cấp cho quá trình trên đúng bằng ΔE và được gọi là năng lượng cộng hưởng từ nhân. Giá trị $\nu_0 = \frac{1}{2\pi}\gamma B_0$ được gọi là tần số cộng hưởng từ.

Từ phương trình (4.11) thấy rằng các hạt nhân có hằng số từ hồi chuyển γ khác nhau, cho nên khi đặt trong cùng một từ trường ngoài B_0 chúng sẽ có giá trị ν_0 khác nhau, hoặc đối với một loạt hạt nhân khi đặt trong từ trường ngoài khác nhau chúng sẽ có tần số cộng hưởng khác nhau *(bảng 4.2)*.

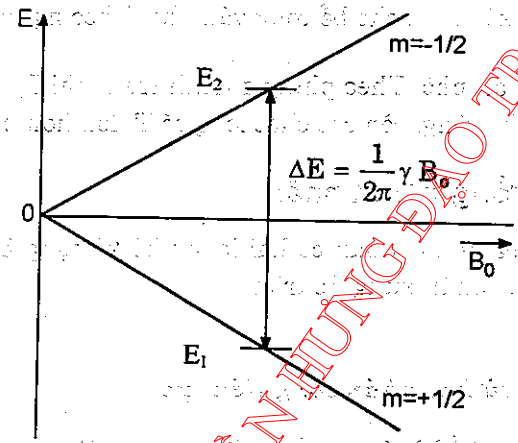
DIỄN ĐÀN TOÁN - LÝ - HÓA 1000 TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

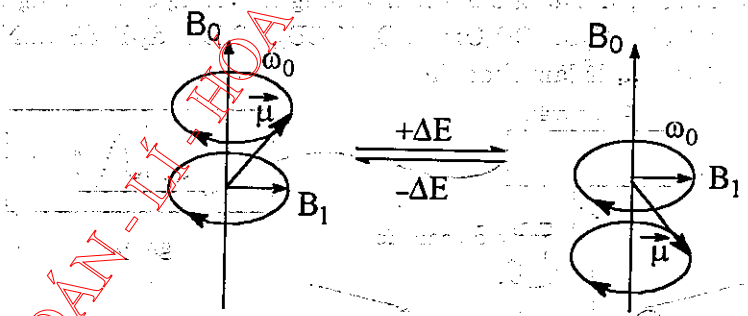
Bảng 4.2 Tần số cộng hưởng của một số hạt nhân.

Hạt nhân từ	Từ trường B_0 (G)	Hằng số γ (10^7rad. $T^{-1}S^{-1}$)	tần số cộng hưởng ν_0 (MHz)
^1H	10000	26,75	42,5759
	23487		100,00
^{13}C	23487	6,726	25,145
^{19}F	23487	25,167	94,094
^{31}P	23487	10,829	40,481



Hình 4.3 Sơ đồ phân bố mức năng lượng của hạt nhân có I=½ trong từ trường ngoài.

Để cung cấp năng lượng cho các hạt nhân, người ta thực hiện bằng cách tác động một từ trường biến đổi B_1 có hướng vuông góc với từ trường B_0 và quay với tốc độ quay của momen từ $\vec{\mu}$ cùng tốc độ quay ω_0. Chính từ trường B_1 sẽ gây ra sự cộng hưởng của các hạt nhân từ.



Hình 4.4 Tác dụng của từ trường B_1 lên hạt nhân.

4.1.4. Hiệu ứng hồi phục spin-spin

Sự hồi phục spin-spin có thể thực hiện theo hai cơ chế gọi là hồi phục spin mạng lưới và hồi phục spin-spin.

Hồi phục spin mạng lưới hay còn gọi là hồi phục dọc được thực hiện do các hạt nhân nằm ở mức năng lượng cao truyền năng lượng sang các phân tử xung quanh (mạng lưới phân tử) để trở về trạng thái năng lượng thấp. Hiệu ứng hồi phục này được đặc trưng bằng hằng số thời gian T_1 (gọi là thời gian hồi phục dọc).

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 10&12 TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Hồi phục spin-spin hay còn gọi là hồi phục ngang là do có sự chuyển năng lượng từ hạt nhân này sang hạt nhân khác, năng lượng không mất đi nhưng trải rộng ra trong số hạt nhân, làm mất tín hiệu đi và mở rộng vân phổ. Đặc trưng cho hiệu ứng này là hằng số thời gian T_2 (gọi là thời gian hồi phục ngang).

Nghịch đảo của thời gian T_1 và T_2 là hằng số tốc độ R_1 và R_2:

$$R_1 = \frac{1}{T_1} \quad \text{và} \quad R_2 = \frac{1}{T_2}$$

Thời gian T_2 được xác định cho bề rộng vân phổ. Theo nguyên lí bất định thì: $\Delta\nu = \dfrac{1}{2\pi T_2}$

với $\Delta\nu$ là bề rộng vân phổ. Theo phương trình trên, khi T_2 nhỏ thì $\Delta\nu$ lớn, vì thế các chất rắn có T_2 nhỏ nên vân phổ rộng, còn các chất lỏng có T_2 lớn hơn nên vân phổ hẹp.

4.2. Phổ kế cộng hưởng từ hạt nhân

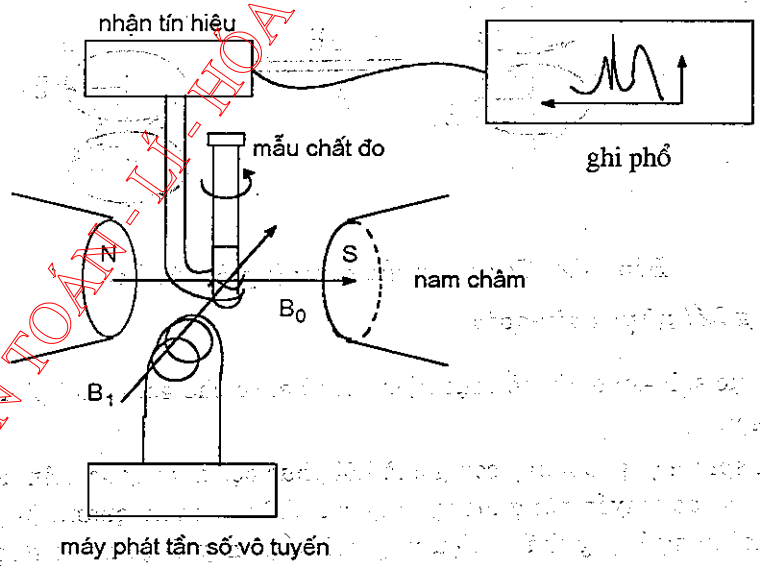
Phổ kế cộng hưởng từ hạt nhân có hai loại: phổ kế cộng hưởng từ hạt nhân liên tục và phổ kế cộng hưởng từ hạt nhân xung Fourier.

Sơ đồ cấu tạo:

1- Phổ kế cộng hưởng từ hạt nhân sóng liên tục

Bộ phận chính của phổ kế cộng hưởng từ hạt nhân là một nam châm điện hay nam châm siêu dẫn có từ trường B_0 đồng nhất , một bộ phận phát tần số vô tuyến để tạo từ trường B_1 và một cuộn từ cảm để nhận tín hiệu. Mẫu được đặt trong một ống thủy tinh dài 20 cm có đường kính 5 mm và quay liên tục để từ trường tác động đồng nhất vào mọi chỗ của mẫu *(hình 4.5)*. Từ trường B_1 được phát liên tục nên thiết bị này được gọi là phổ kế cộng hưởng từ hạt nhân sóng liên tục. Phổ kí nhận được là đường cong của hàm số phụ thuộc vào tần số f(ν).

Mẫu ghi ở dạng dung dịch. Dung môi thường dùng là những chất không chứa hạt nhân từ proton như CCl_4, $CDCl_3$, D_2O, CD_3OD, CD_3COCD_3, C_6D_6, d_6-DMSO...Người ta dùng tetrametylsilan (TMS) $(CH_3)_4Si$ để làm chất chuẩn.



Hình 4.5 *Sơ đồ phổ kế cộng hưởng từ hạt nhân sóng liên tục.*

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON
DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP.QUY NHƠN

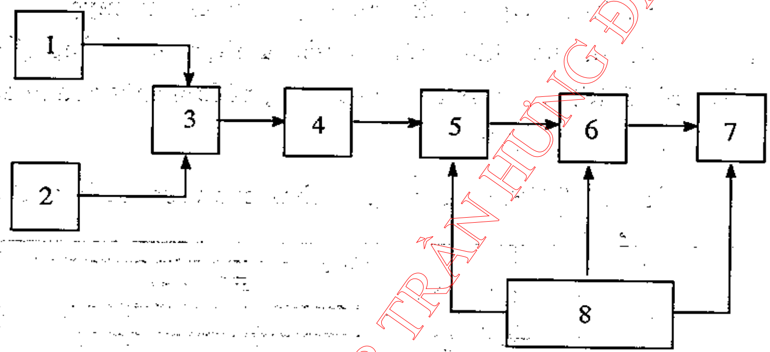
WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

2- Phổ kế cộng hưởng từ hạt nhân biến đổi Fourier

Phổ kế loại này có từ trường B_1 tác dụng không liên tục lên hạt nhân nguyên tử được đặt trong từ trường B_0. Tín hiệu cao tần được điều phức bằng các xung vuông và hẹp. Sau các xung $\pi/2$ và π nhận được tín hiệu cảm ứng tự do (FID). Phổ kí nhận được dưới dạng đường cong của hàm số phụ thuộc thời gian f(t). Trên phổ kí đo được thời gian phục hồi ngang T_2 và thời gian phục hồi dọc T_1.

Ở trên đã biết phổ kí của phổ kế cộng hưởng từ hạt nhân liên tục nhận được đường cong của hàm số phụ thuộc vào tần số f(ν). Bản chất của hai hàm f(t) và f(ν) là như nhau và có thể biến đổi cho nhau. Từ nguyên lí này người ta đã xây dựng phổ kế biến đổi Fourier.

Ưu điểm của phổ kế biến đổi Fourier là có độ nhạy cao, có tỉ số tín hiệu/nhiễu (S/N) lớn và có thể thu được nhiều thông số từ phổ kí. Trên hình 4.6 chỉ ra sơ đồ phổ kế cộng hưởng từ hạt nhân Fourier.



Hình 4.6 Sơ đồ phổ kế cộng hưởng từ hạt nhân biến đổi Fourier:

1-máy phát tín hiệu cao tần
2-tạo dãy xung theo các chương trình định sẵn
3-điều phức biên độ cao tần theo xung vuông
4-đầu đo tạo từ trường không liên tục
5-thu tín hiệu tích lũy ghi các điểm phổ của cảm ứng tự do
6-biến đổi Fourier
7-ghi phổ f(ν)
8-máy tính điều hành chương trình xung, tích lũy số liệu, biến đổi Fourier, xử lí, ghi phổ

4.3. Độ chuyển dịch hoá học

4.3.1. Định nghĩa

Các hạt nhân nguyên tử được bao quanh bởi một lớp vỏ electron, mà lớp vỏ này cũng sinh ra một từ trường riêng B' nên khi từ trường B_0 tác động lên hạt nhân thường bị các từ trường riêng B' triệt tiêu một phần, do đó từ trường thực tác động lên hạt nhân chỉ là $B_e<B_0$. Người ta gọi B_e là từ trường hiệu dụng:

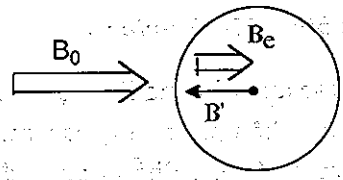
$$B_e=B_0(1-\sigma)$$

σ được gọi là hằng số chắn, có giá trị khác nhau đối với mỗi hạt nhân nguyên tử trong phân tử.

BỒI DƯỠNG TOÁN - LÍ - HÓA CẤP 2-3 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP.QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM



Hình 4.7 Sơ đồ tác dụng của B_0 lên hạt nhân.

Khi đặt hai hạt nhân nguyên tử A và B của cùng một nguyên tố vào một từ trường ngoài B_0, do hai hằng số chắn σ_A và σ_B khác nhau nên:

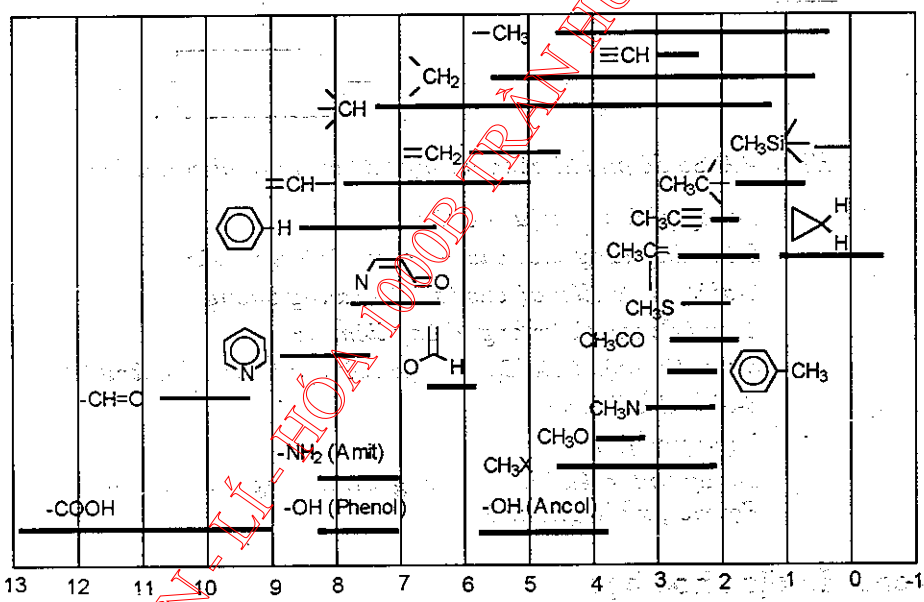
$$\nu_A = \frac{1}{2\pi}\gamma B_0(1-\sigma_A) \qquad (4.12)$$

$$\nu_B = \frac{1}{2\pi}\gamma B_0(1-\sigma_B) \qquad (4.13)$$

Hiệu số $\Delta\nu=\nu_A-\nu_B \sim \sigma_B-\sigma_A$. Ta không thể đo trực tiếp được giá trị tuyệt đối hằng số chắn của mỗi hạt nhân, nhưng có thể đo được hiệu trên. Người ta nhận thấy hằng số chắn của hợp chất tetrametylsilan $(CH_3)_4Si$ (TMS) là lớn nhất nên đã dùng nó làm chất chuẩn để đo hiệu:

$$\delta=\sigma^{TMS}-\sigma^{X}$$

ở đây σ^{TMS} là hằng số chắn của chất TMS, σ^{X} là hằng số chắn của proton của chất cần đo bất kì.



Hình 4.8 Độ chuyển dịch hoá học phổ cộng hưởng từ hạt nhân proton.

Giá trị δ được gọi là độ chuyển dịch hoá học. Từ phương trình 4.12 và 4.13 suy ra:

$$\delta = \frac{\nu_X - \nu_{TMS}\ (Hz)}{\nu_0\ (MHz)} = \frac{\nu_x - \nu_{TMS}\ (Hz)}{\nu_o.10^6\ (Hz)} = a.10^{-6} = a.ppm$$

ν_X là tần số cộng hưởng của proton (đơn vị Hz), ν_0 là tần số máy đo (đơn vị MHz), δ là đại lượng không có thứ nguyên, người ta kí hiệu 10^{-6} là ppm (phần triệu). Giá trị δ không phụ thuộc vào tần số máy đo, trong khi giá trị ν thay đổi theo tần số máy.

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 10/10B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

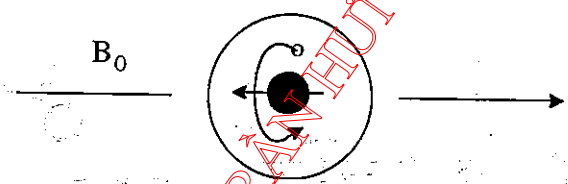
Độ chuyển dịch hoá học của phổ cộng hưởng từ hạt nhân proton (^{1}H-NMR) nằm trong phạm vi từ 0-12 ppm *(hình 4.8)*.

4.3.2. Nguyên nhân xuất hiện hằng số chắn

Hằng số chắn xuất hiện do hai nguyên nhân:

(1) Hiệu ứng nghịch từ (diamagnetic)

Các electron bao quanh nguyên tử sinh ra một từ trường riêng, ngược chiều với từ trường ngoài nên làm giảm tác dụng của nó lên hạt nhân nguyên tử. Lớp vỏ electron càng dày đặc thì từ trường riêng ngược chiều với từ trường ngoài càng lớn tức hằng số chắn càng lớn *(hình 4.9)*.



***Hình 4.9** Sơ đồ hiệu ứng nghịch từ.*

Vì vậy các proton nằm trong các nhóm có các nguyên tử hay nhóm nguyên tử gây hiệu ứng -I (Cl, Br, I, NO_2,...) sẽ có hằng số chắn nhỏ, trái lại khi có các nhóm nguyên tử gây hiệu ứng +I (CH_3, C_2H_5,...) có hằng số chắn lớn.

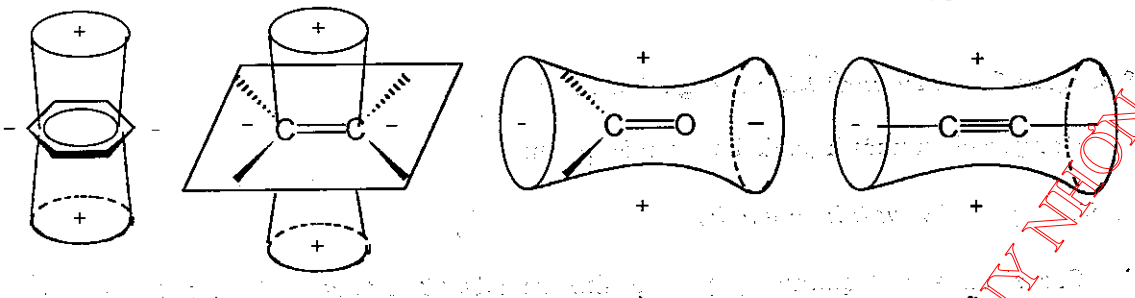
(2) Hiệu ứng thuận từ (paramagnetic)

Bao quanh phân tử là lớp vỏ electron, các electron này chuyển động sinh ra một dòng điện vòng, do đó xuất hiện một từ trường riêng có hướng thay đổi ngược hướng hoặc cùng hướng với từ trường ngoài. Tập hợp tất cả các điểm trên các đường sức mà tại đó tiếp tuyến vuông góc với từ trường ngoài sẽ tạo nên một mặt parabon. Phía trong mặt parabon, từ trường tổng hợp nhỏ hơn B_0 vì từ trường riêng ngược hướng với từ trường ngoài, còn phía ngoài parabon thì từ trường tổng hợp lớn hơn B_0 vì từ trường riêng cùng hướng với từ trường ngoài. Do đó hằng số chắn phía ngoài parabon nhỏ, còn ở phía trong parabon thì hằng số chắn lớn, nghĩa là độ chuyển dịch hoá học của các proton nằm phía ngoài parabon sẽ lớn, còn phía trong sẽ nhỏ. Ví dụ, ở phân tử benzen, nhóm C=O, nối đôi C=C và nối ba C≡C *(hình 4.10)*.

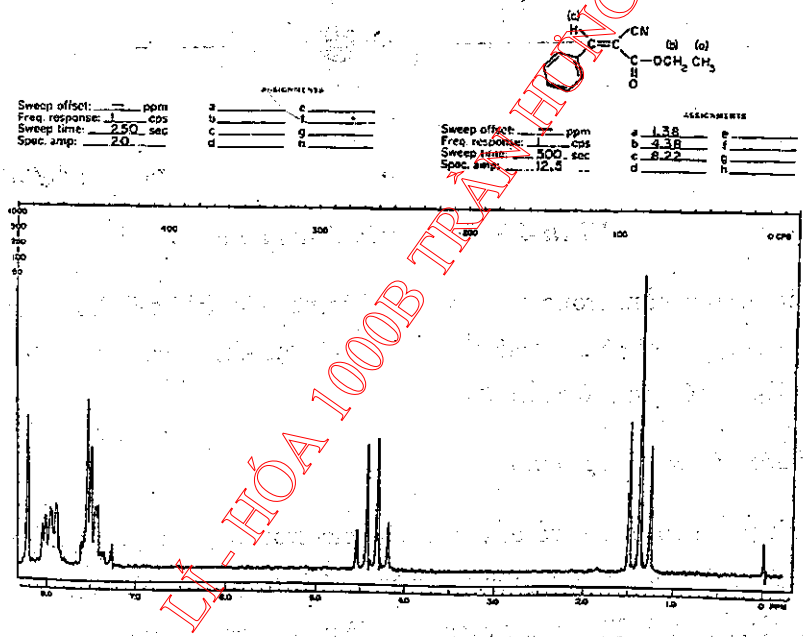
DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 100B TRẦN HƯNG ĐẠO QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM



Hình 4.10 Hiệu ứng thuận từ ở a) benzen; b) nhóm C=C; c) nhóm C=O; d) nhóm C≡C.



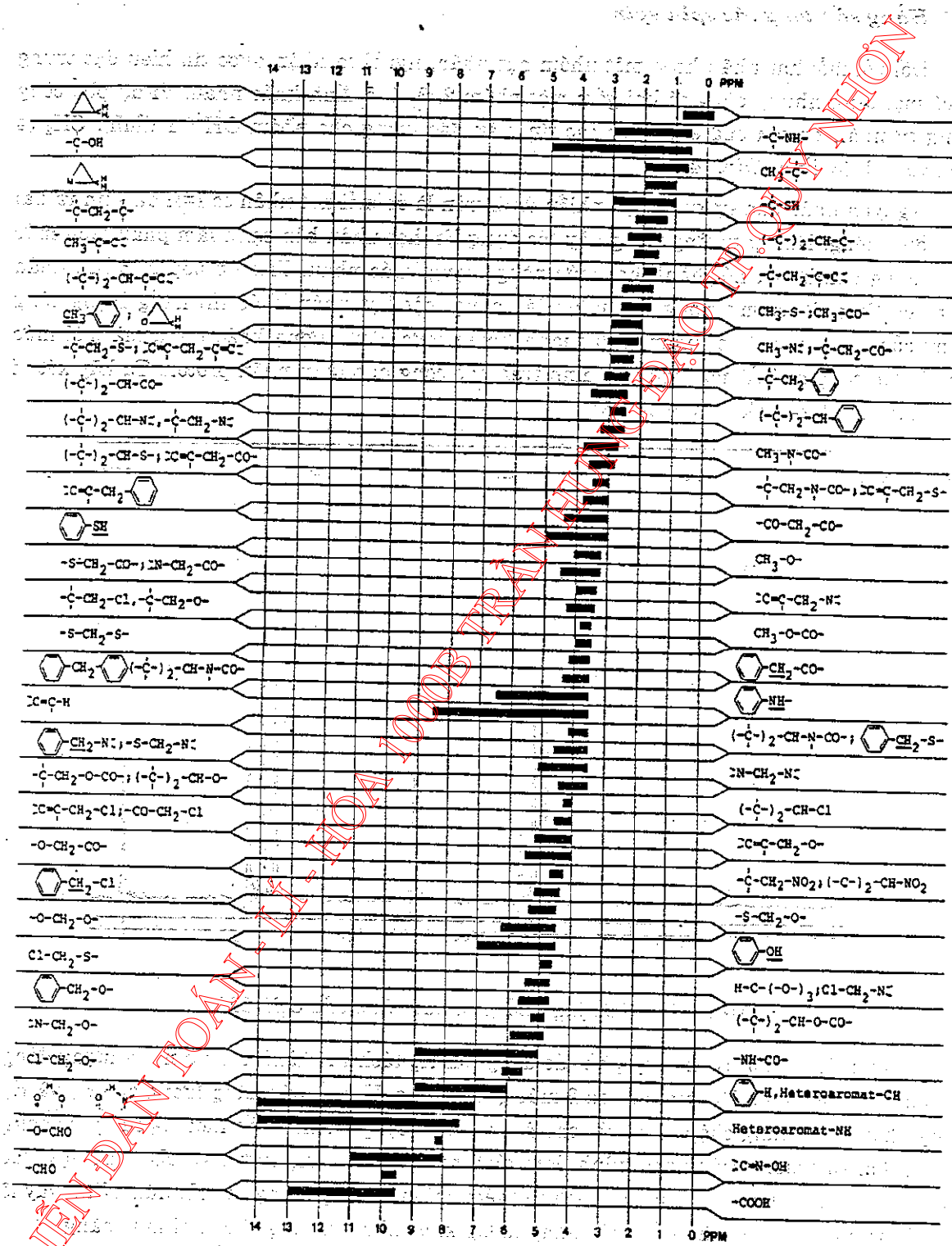
Hình 4.11 Phổ cộng hưởng từ nhân proton.

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Bảng 4.3 Độ chuyển dịch hoá học proton ^1H.



DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP.QUY NHƠN

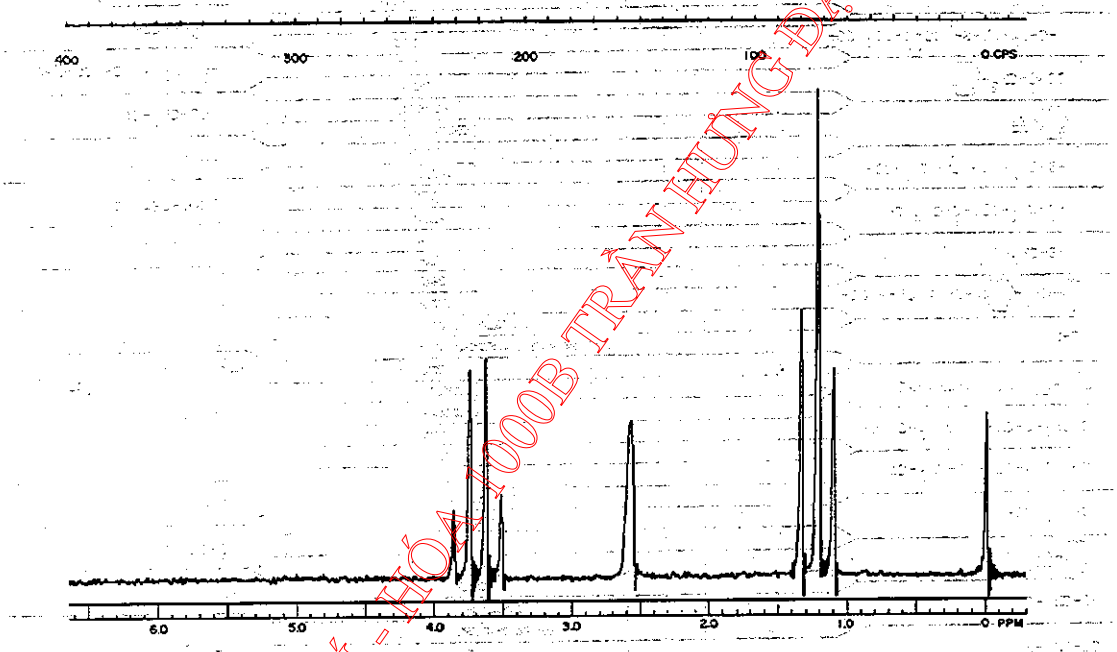
https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

4.4.1. Hằng số tương tác spin-spin

Đối với mỗi hạt nhân hoặc một nhóm hạt nhân, người ta nhận được tín hiệu đặc trưng chỉ có một đỉnh nhưng cũng có khi gồm một nhóm 2, 3, 4, 5 đỉnh khác nhau. Ví dụ phổ cộng hưởng từ nhân proton của etanol có các tín hiệu đặc trưng cho nhóm OH (1 đỉnh), CH_2 (4 đỉnh) và CH_3 (3 đỉnh) *(hình 4.12)*.

Nguyên nhân của sự xuất hiện nhiều đỉnh trên là do mỗi hạt nhân có I=½ đã sinh ra hai từ trường riêng. Hai từ trường riêng này tác dụng lên hạt nhân bên cạnh làm phân tách mức năng lượng chính của nó thành hai mức năng lượng khác nhau. Trường hợp 2, 3 hạt nhân cùng tác động từ trường riêng của mình lên cùng một hạt nhân khác thì năng lượng cộng hưởng của hạt nhân đó bị phân tách thành nhiều mức năng lượng khác nhau mà mỗi mức năng lượng cộng hưởng này cho một đỉnh trên phổ cộng hưởng từ nhân proton. Ta hãy xét ví dụ ở phân tử 1,1,2-tricloetan dưới đây:



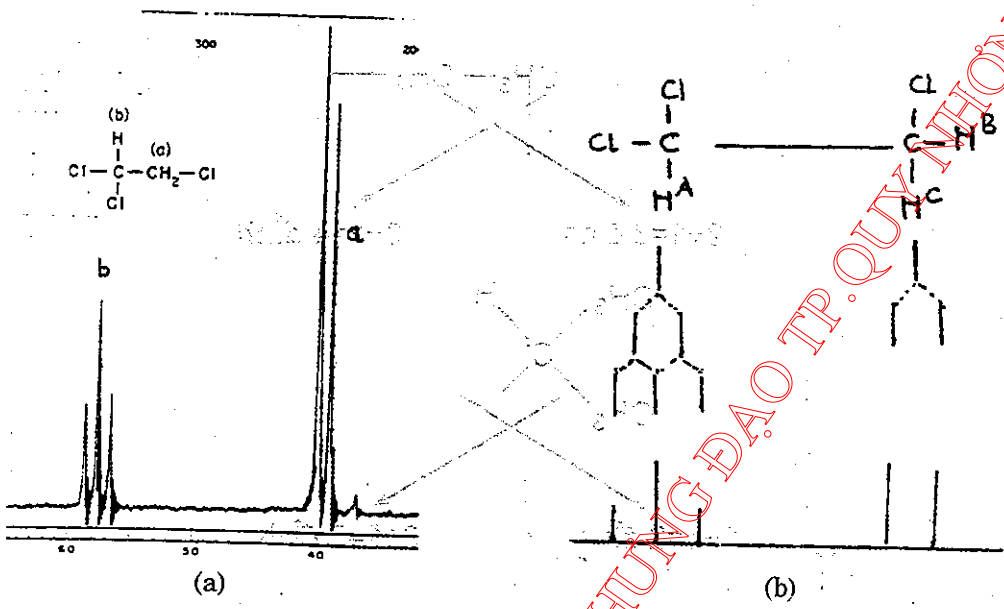
Hình 4.12 Phổ cộng hưởng từ hạt nhân của C_2H_5OH.

Proton H_A có hai từ trường phụ tác động lên H_B tách ra thành 2 mức năng lượng đồng thời cũng tác động lên H_C làm tách ra 2 mức năng lượng. Vì hai mức năng lượng của H_B và H_C giống nhau nên chúng chập nhau chỉ cho hai tín hiệu cộng hưởng. Đến lượt H_B cũng tác động lên H_A hai từ trường riêng của mình, làm tách ra hai mức năng lượng và H_C cũng vậy, tác động lên H_A hai từ trường riêng làm tách ra thêm hai mức năng lượng của H_A nữa. Như vậy lẽ ra ở H_A sẽ phân tách ra thành 4 mức năng lượng khác nhau, nhưng vì có hai mức năng lượng bằng nhau nên chỉ còn phân tách thành 3 mức năng lượng khác nhau, tức là cho 3 tín hiệu cộng hưởng từ khác nhau.

DIỄN ĐÀN HÓA LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

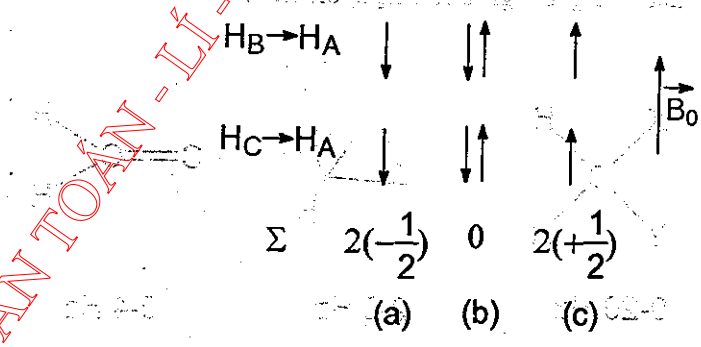
WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM



Hình 4.13 Phổ cộng hưởng từ nhân proton (a) và sơ đồ tương tác spin-spin proton (b) của 1,1,2-tricloetan.

Khoảng cách giữa hai đỉnh liền nhau (tức là hiệu số tần số của hai đỉnh) đo bằng Hz và được gọi là hằng số tương tác spin-spin J.

Trong phổ cộng hưởng từ nhân proton, người ta chú ý đến tương tác giữa các proton cạnh nhau có hằng số $J_{H\text{-}H}$, còn trong phổ cộng hưởng từ hạt nhân ^{13}C, người ta chú ý đến tương tác spin-spin giữa ^{13}C và ^{1}H có $J_{C\text{-}H}$ là chủ yếu.



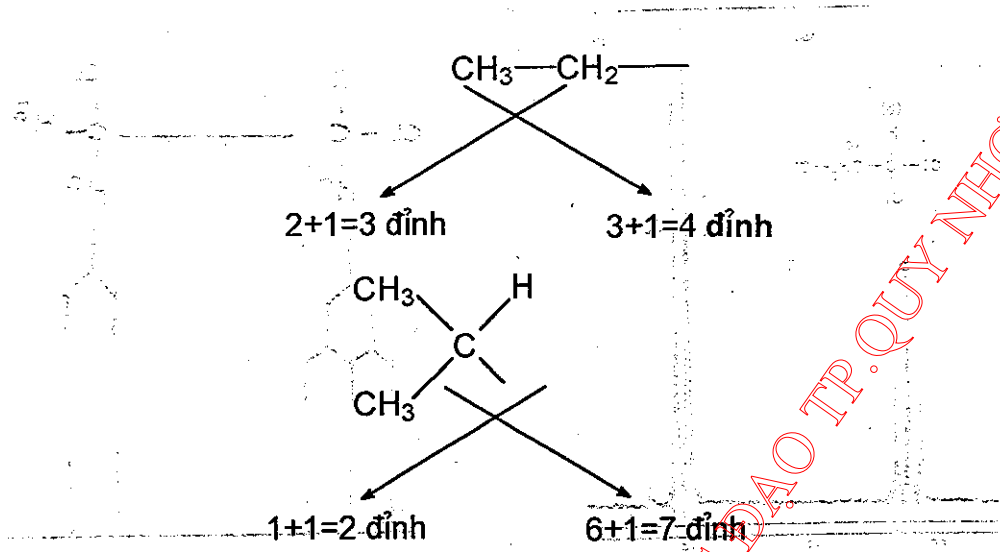
Hình 4.14 Sơ đồ biểu diễn sự tổ hợp các từ trường riêng H_B và H_C tác động lên hạt nhân H_A: a) từ trường riêng ngược chiều với từ trường ngoài; b) từ trường riêng triệt tiêu nhau; c) từ trường riêng cùng chiều với từ trường ngoài cộng tín hiệu cộng hưởng gấp đôi hai tín hiệu bên cạnh.

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 10000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

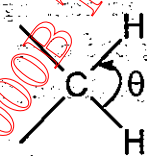
Đối với trường hợp đơn giản, số vạch tối đa tính theo số hạt proton của nhóm tương tác bên cạnh. Nếu nhóm tương tác có n hạt nhân thì số vạch tối đa là n+1, ví dụ:



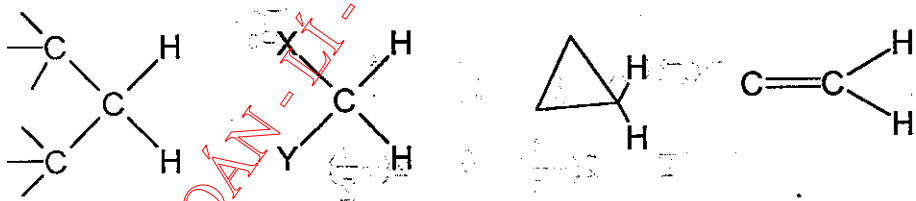
4.4.2. Các loại tương tác spin-spin giữa các proton

4.4.2.1. Tương tác geminal

Tương tác giữa các proton ở trên cùng một nguyên tử cacbon:



|J|=0-20 Hz (phụ thuộc vào góc θ giữa hai nguyên tử H)



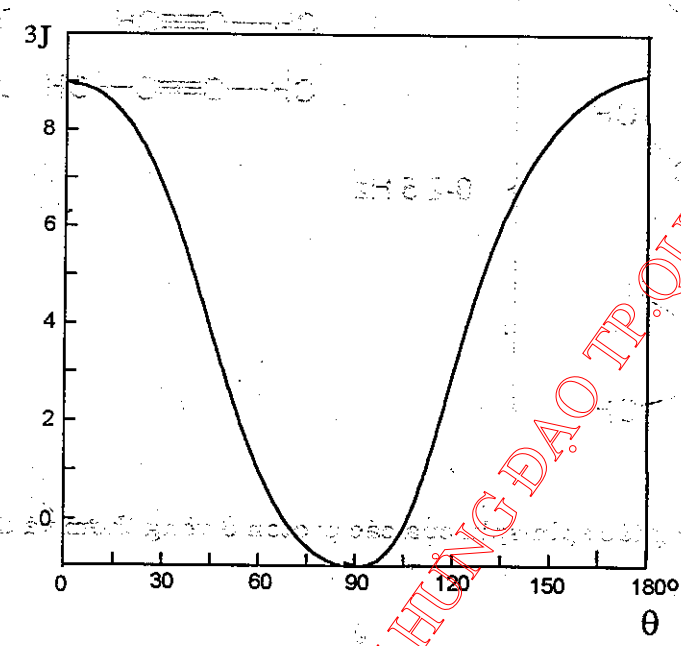
4.4.2.2. Tương tác vicinal

Tương tác giữa hai proton ở hai nguyên tử cacbon cạnh nhau, với J=2-9 Hz (phụ thuộc vào góc θ giữa mặt phẳng chứa hai nguyên tử H)

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

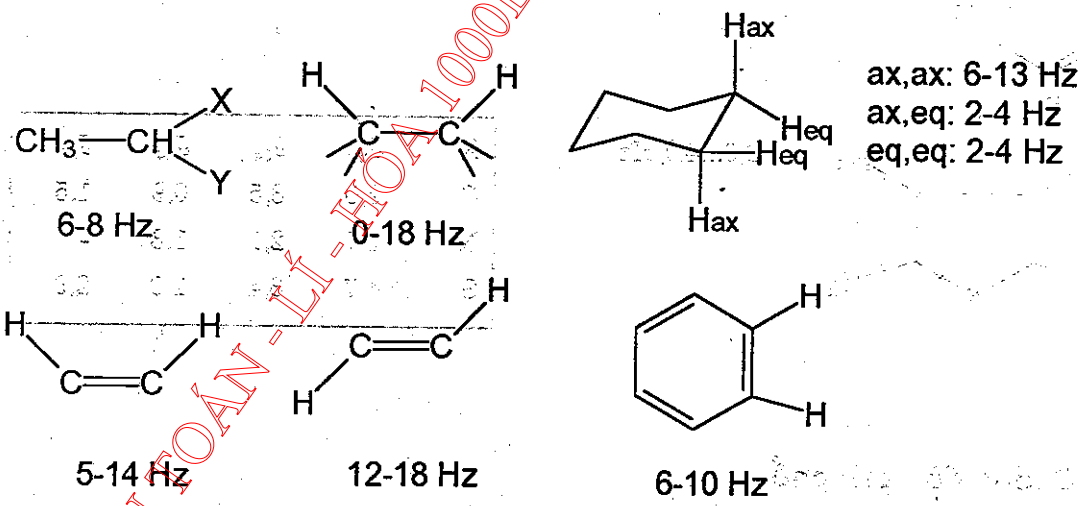
https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM



Hình 4.15 Sự phụ thuộc của J_{vic} vào góc θ.

Ví dụ:



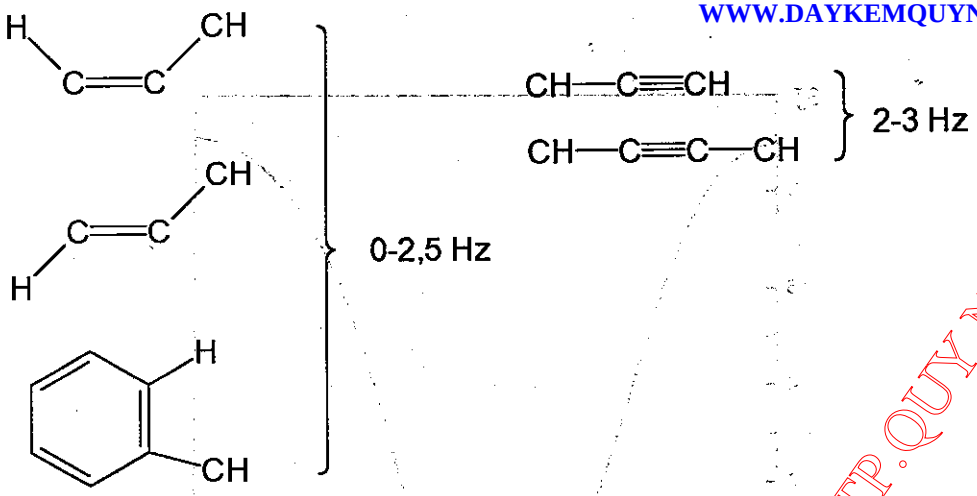
4.4.2.3. Tương tác spin-spin mạch dài

Các proton ở cách nhau 1,2 nguyên tử cacbon có J=0-3 Hz.

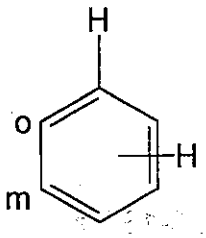
DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP.QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM



4.4.2.4. Tương tác spin-spin của các proton ở vòng thơm và dị vòng

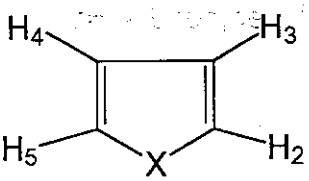


J

o: 7...10 Hz

m: 2...3 Hz

p: 0...1 Hz



0,9...4,7 Hz

X	J_{23}	J_{34}	J_{24}	J_{25}
O	2,0	3,5	0,9	1,5
N	2,7	2,1	1,3	-
S	4,7	3,4	1,0	2,9

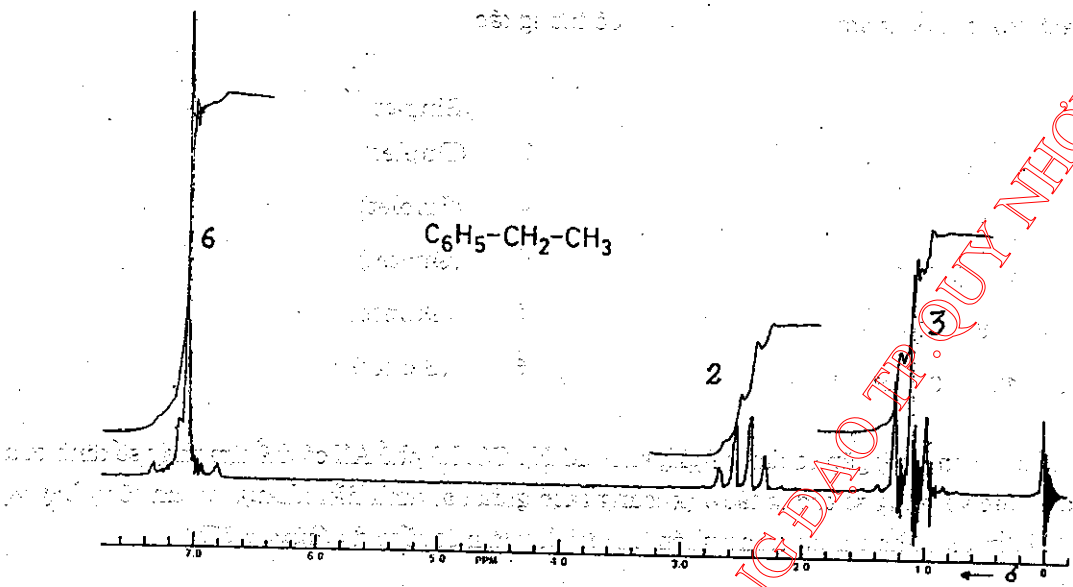
4.5. Cường độ vạch phổ

Diện tích giới hạn bởi đường cong phổ tỉ lệ với số proton của mỗi nhóm, nhưng việc đo diện tích này khó chính xác. Người ta sử dụng đường cong tích phân thay thế vì chiều cao bậc thang của nó tỉ lệ với số proton ở mỗi nhóm. Ngoài ra, chiều cao bậc thang còn tỉ lệ với nồng độ chất trong dung dịch, do đó người ta có thể tính được nồng độ chất dựa vào đường chuẩn và chất chuẩn (*hình 4.16*).

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM



Hình 4.16 Phổ cộng hưởng từ nhân proton của etylbenzen. Chiều cao bậc thang đường cong tích phân tỉ lệ với số proton ở mỗi nhóm.

4.6. Phân tích phổ cộng hưởng từ hạt nhân Proton

4.6.1. Phân loại phổ

Khi trong phân tử có các nhóm hạt nhân tương tác với nhau, người ta kí hiệu các hạt nhân đó bằng các chữ cái A, B, C,...,M, X. Các hạt nhân có độ chuyển dịch hoá học như nhau gọi là các hạt nhân tương đương và được kí hiệu bằng một loại chữ cái, có chỉ số ở dưới bên phải chữ cái đó để chỉ số hạt tương đương.

Nếu tỉ số $\frac{\nu_A - \nu_B}{J_{AB}} > 1$ thì các hạt nhân được kí hiệu bằng các chữ cái cách xa nhau, như AX, AX_2,...còn trường hợp khác được kí hiệu bằng các chữ cái liền nhau như AB,A_2B,ABC,...

Trường hợp $\frac{\Delta\nu}{J} > 6$ thì xếp vào phổ bậc 1, còn lại xếp vào phổ bậc cao.

Phân tích phổ cộng hưởng từ hạt nhân là để tìm các giá trị độ chuyển dịch hoá học và hằng số tương tác J cho mỗi proton.

4.6.2. Phân tích phổ bậc 1

Đối với phổ bậc 1, có thể áp dụng qui tắc số vạch tối đa bằng n+1 (n là số hạt nhân nhóm bên cạnh tương tác) và tỉ lệ chiều cao các đỉnh trong một nhóm tuân theo qui tắc Pascan:

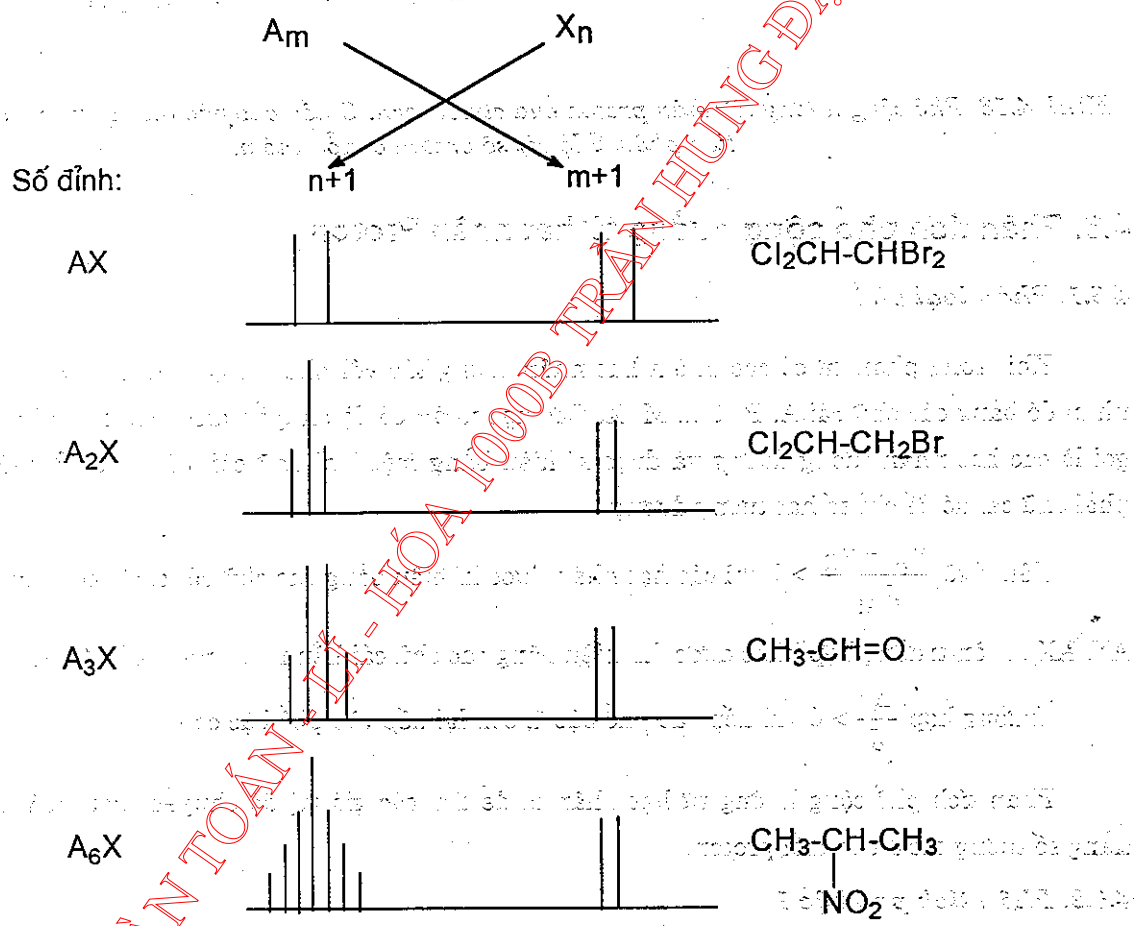
ĐỀN ĐÁP TOÁN - LÍ - HÓA 100B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Tỉ lệ chiều cao các vạch trong mỗi nhóm	Số vạch trong nhóm có tương tác	
1	1	(Singlet)
1 1	2	(Đuplet)
1 2 1	3	(Triplet)
1 3 3 1	4	(Quatet)
1 4 6 4 1	5	(Quintet)
1 5 10 10 5 1	6	(Sextet)

Hệ phổ bậc 1 thường gặp có dạng A_mX_n và $A_mM_nX_y$. Các hệ phổ AX có thể tìm thấy số đỉnh của mỗi nhóm dễ dàng và hằng số tương tác J (khoảng cách giữa hai đỉnh liền nhau), và tần số ν_A hay ν_X (điểm giữa hai đỉnh xa nhau nhất trong nhóm). Dưới đây là một số ví dụ *(hình 4.17)*.



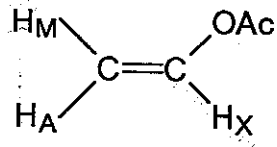
***Hình 4.17** Phổ cộng hưởng từ nhân proton của một số hợp chất.*

Hệ phổ AMX gồm 3 proton không tương đương tương tác với nhau, ví dụ ở hợp chất vinyl axetat:

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

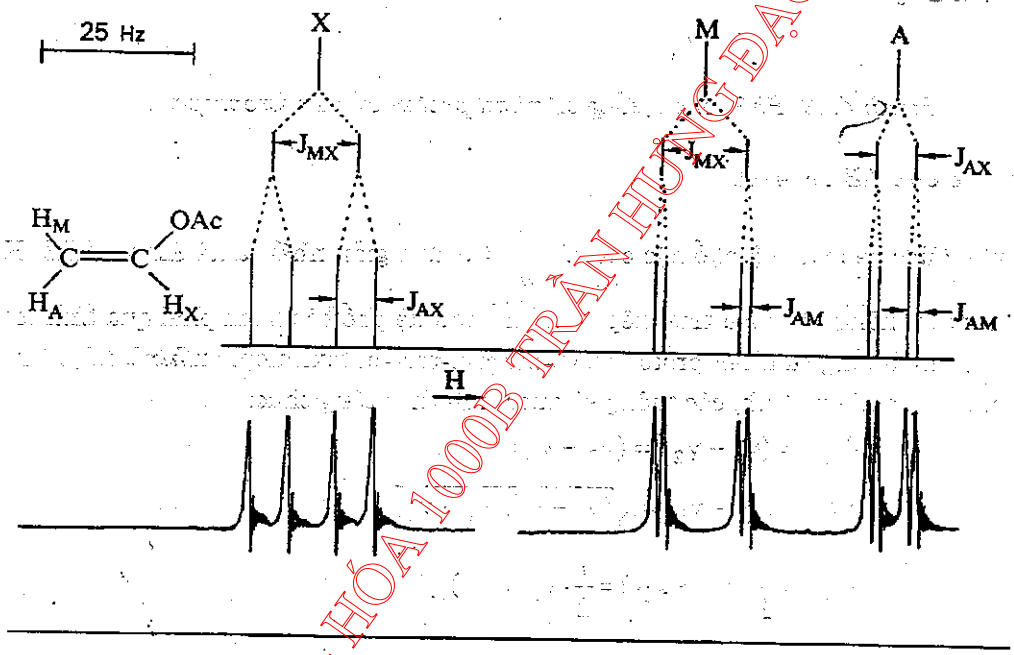
https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM



ta thu được 3 nhóm phổ *(hình 4.18)*.

Trường hợp chung $A_nM_mX_y$ cũng thu được 3 nhóm đỉnh, nhưng số đỉnh ở mỗi nhóm phụ thuộc vào số proton ở nhóm bên cạnh. Ví dụ hợp chất 1-nitropropan CH_3-CH_2-CH_2-NO_2 thuộc hệ phổ $A_3M_2X_2$ cho phổ cộng hưởng từ hạt nhân ở hình 4.19 gồm ba nhóm đỉnh.



Hình 4.18 Phổ cộng hưởng từ hạt nhân proton của vinyl axetat.

Nhóm CH_3 và CH_2 ở vị trí 1 đều có 3 đỉnh, nhưng nhóm CH_2 ở vị trí 2 có 6 đỉnh (theo lí thuyết là 12 đỉnh). Ngoài ra, nhận thấy rằng cường độ vạch phổ của nhóm CH_3và CH_2 không tuân theo chính xác tỉ lệ 1:2:1. Các đỉnh nằm về hướng các tín hiệu của nhóm tương tác thì có cường độ lớn hơn. Người ta gọi hiện tượng này là hiệu ứng mái nhà. Do:

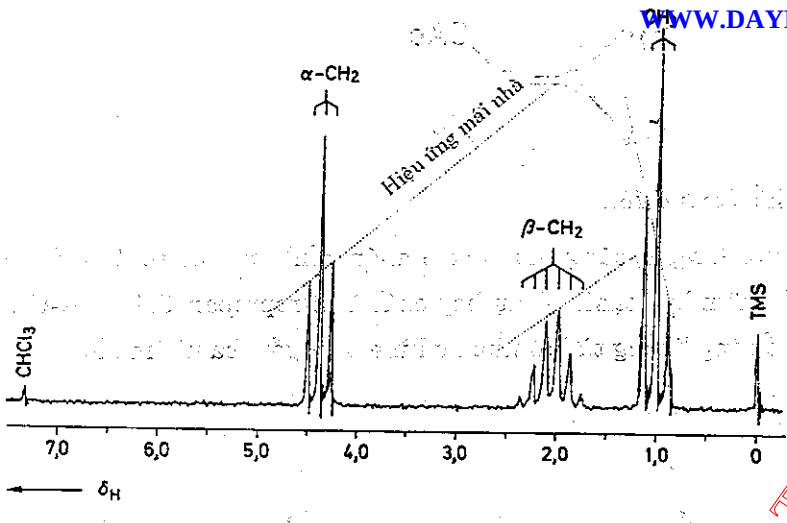
$$\frac{\nu_A - \nu_M}{J_{AM}} < \frac{\nu_X - \nu_M}{J_{MX}}$$

nên hiệu ứng mái nhà ở nhóm metyl mạnh hơn nhóm metylen *(xem hình 4.19)*.

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM



Hình 4.19 Phổ cộng hưởng từ nhân proton của 1-nitropropan.

4.6.3. Phổ bậc cao AB và ABX

Các phổ được xếp vào hệ phổ bậc cao có $\frac{\Delta\nu}{J} < 6$ đơn giản nhất là hệ AB và ABX. Không thể tìm ở đây các thông số δ và J trực tiếp trên phổ như hệ phổ bậc 1 mà phải qua tính toán, ta xét ví dụ phổ cộng hưởng từ nhân proton của 3-brom-2-tert-butoxithiophen *(hình 4.20)* thuộc hệ phổ AB gồm hai cặp nhóm đỉnh, các thông số được tính theo công thức:

$$J_{AB} = (\nu_1 - \nu_2) = (\nu_3 - \nu_4)$$

$$\delta_{AB} = \nu_A - \nu_B = \sqrt{(\nu_1 - \nu_4)(\nu_2 - \nu_3)}$$

$$\nu_{AB} = \frac{1}{2}(\nu_A + \nu_B) = \frac{1}{2}(\nu_2 + \nu_3)$$

$$\nu_A = \nu_{AB} + \frac{1}{2}\delta_{AB} \quad (Hz)$$

$$\nu_B = \nu_{AB} - \frac{1}{2}\delta_{AB} \quad (Hz)$$

$$\delta_A = \frac{\nu_A}{\nu_o} \quad (ppm)$$

$$\delta_B = \frac{\nu_B}{\nu_o} \quad (pmm)$$

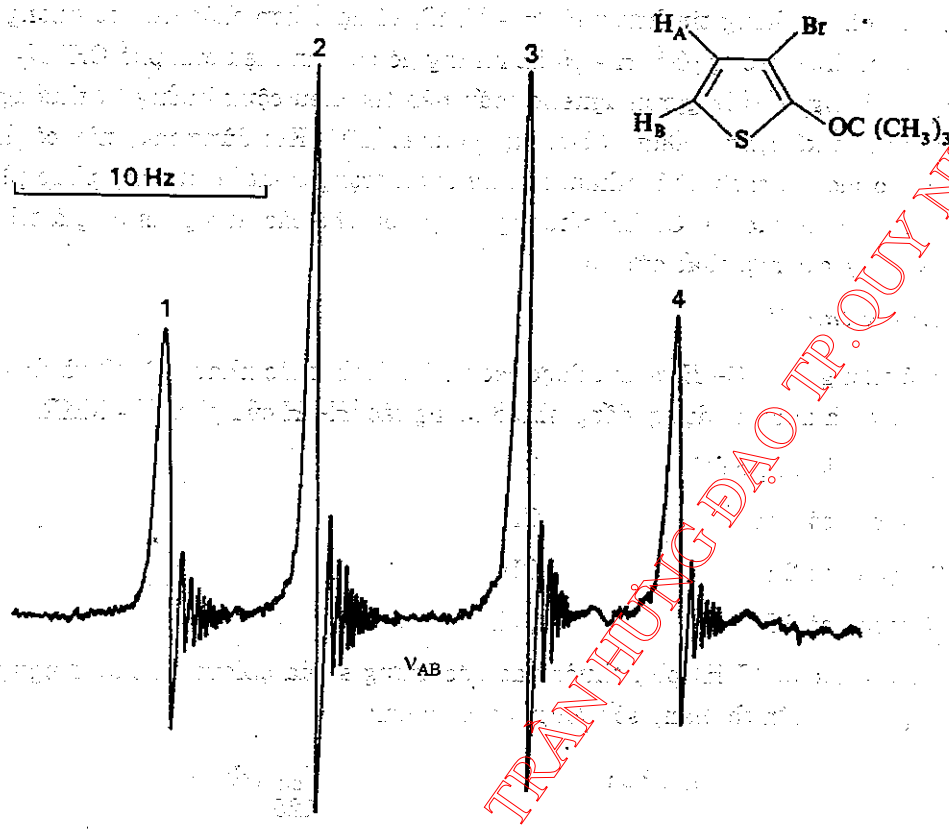
ν_o là tần số máy (MHz)

Hệ phổ ABX gồm 3 hạt nhân không tương đương tương tác với nhau, ví dụ ở phân tử stirenoxit. Hệ phổ gồm hai phần: phần AB và phần X tách biệt nhau, các thông số của phổ có thể tính được từ tần số của các đỉnh trong phổ *(xem hình 4.21)*.

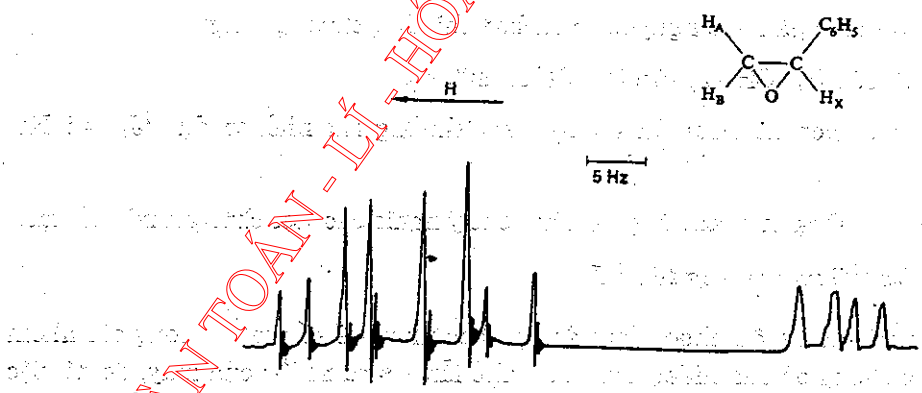
DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM



Hình 4.20 Phổ cộng hưởng từ nhân proton của 3-brom-2-tert-butoxithiophen.



Hình 4.21 Phổ cộng hưởng từ hạt nhân proton của stirenoxit (hệ phổ ABX).

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

4.7. Phân tích phổ cộng hưởng từ hạt nhân ^{13}C (^{13}C - NMR)

Vì tất cả các hợp chất hữu cơ đều chứa nguyên tử cacbon mà trong tự nhiên, nguyên tử

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

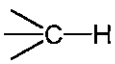
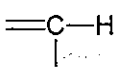
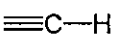
cacbon-13 chiếm tỉ lệ 1,1% nên phổ cộng hưởng từ hạt nhân ^{13}C (^{13}C-NMR) hiện nay có ý nghĩa quan trọng, nó cho nhiều thông tin hơn phổ ^1H - NMR, ví dụ ở hợp chất hữu cơ không chứa hidro thì không có tín hiệu trong phổ ^1H - NMR nhưng nó cho tín hiệu của phổ CHTN-^{13}C. Vì tỉ lệ của ^{13}C nhỏ và hằng số tỉ lệ gyromagnetic thấp nên tín hiệu cộng hưởng từ thường nhỏ, người ta phải dùng phổ kế cộng hưởng từ biến đổi Fourier (FT). Khi dùng máy này có thể ghi phổ ^{13}C - NMR theo một số cách khác nhau, nhưng quan trọng nhất là phương pháp phổ ^{13}C tương tác ^1H và xóa tương tác ^1H. Cả hai phương pháp đều cho các thông tin có giá trị trong việc phân tích cấu trúc các hợp chất hữu cơ.

4.7.1. Phổ ^{13}C tương tác ^1H

Khi ghi phổ tương tác ^{13}C–^1H ta thu được các nhóm đỉnh khác nhau. Vì ^{13}C và ^1H đều có I=½ nên qui tắc đa vạch được áp dụng giống như ở tương tác ^1H–^1H của phổ ^1H - NMR:

singlet (1 vạch)	không có H	C
duplet (2 vạch)	có 1 H	CH
triplet (3 vạch)	có 2 H	CH_2
quartet (4 vạch)	có 3 H	CH_3

Hằng số tương tác J(^{13}C-H) phụ thuộc vào đặc trưng s của obitan lai hoá ở nguyên tử cacbon. Đặc trưng s càng lớn thì hằng số tương tác càng lớn:

	Lai hoá	J_{C-H} (Hz)
	sp^3	125
	sp^2	160
	sp	250

Khi có nhóm thế âm điện gắn vào nguyên tử cacbon thì $^1J_{C-H}$ thường tăng:

CH_4 125 Hz, CH_3Cl 151 Hz, CH_2Cl_2 178 Hz, $CHCl_3$ 209 Hz

Tương tác C và H ở cách xa nhau hơn 1 liên kết thường rất nhỏ, ví dụ $^2J_{C-H}$=5 Hz, thường không thấy.

Tương tác giữa ^{13}C và ^{13}C cạnh nhau cũng rất nhỏ, ít có ý nghĩa cho việc chứng minh cấu tạo.

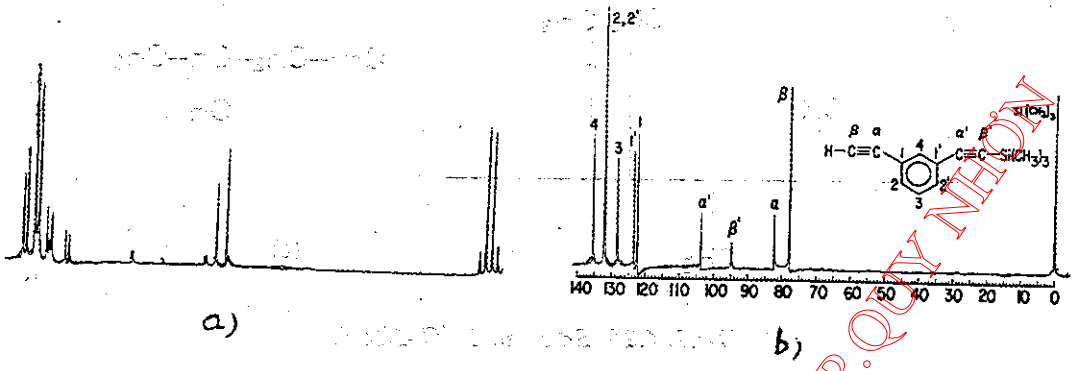
4.7.2. Phương pháp phổ ^{13}C xóa tương tác ^1H

Phổ ^{13}C tương tác ^1H cho nhiều nhóm đỉnh do sự khác nhau về số proton trong các nhóm CH, CH_2 và CH_3, nhưng cường độ của nhiều đỉnh quá nhỏ lẫn với cả nhiễu của máy, do đó việc giải phổ gặp khó khăn, vì vậy người ta đã đưa ra cách làm đơn giản hoá bản phổ để chọn một số thông tin cần thiết, bằng cách xóa đi các vạch tương tác C-H, bây giờ ứng với mỗi nguyên tử cacbon chỉ có 1 vạch phổ. Ví dụ phổ ^{13}C-NMR của 1-etinyl-trimetylsilan etnyl benzen ở hình 4.22.

DIỄN ĐÀN TOÁN LÍ - HÓA 000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

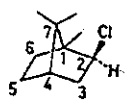


Hình 4.22 Phổ ^{13}C - NMR có tương tác C-H (a) và xóa tương tác C-H (b) của 1-etinyl-3-trimetylsilanetinyl benzen.

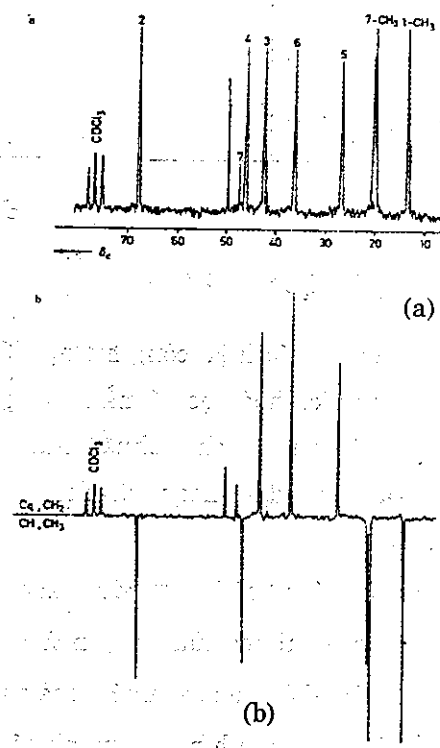
Trong tạp chí , loại phổ ^{13}C - NMR xóa tương tác C-H được kí hiệu là $^{13}C\{^1H\}$ (*hình 4.23a*). Thực tế phổ ^{13}C - NMR tương tác C-H ngày nay ít đo. Thay cho phương pháp đó, người ta dùng các phương pháp kĩ thuật hiện đại như APT (Attached Proton Test) có thể phân biệt được C, CH, CH_2 và CH_3.

Khi dùng kĩ thuật này thì tín hiệu của nhóm C và CH_2 nằm ở phía trên, còn tín hiệu của nhóm CH và CH_3 nằm ở phía dưới (*hình 4.23b*).

Ngoài ra còn sử dụng phương pháp DEPT (Distortioness Enhancement by Polarization Transfer) để ghi phổ, theo phương pháp này tín hiệu CH_3 và CH ở phía trên còn CH_2 ở phía dưới. Ví dụ phổ ^{13}C - NMR ghi theo DEPT của 2-butanol (*hình 4.23c*):



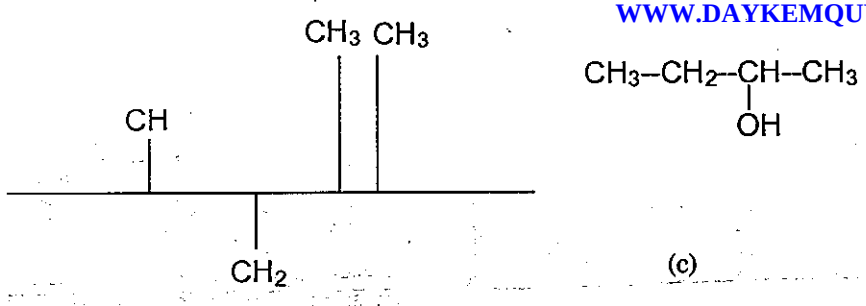
C–1 δ = 49,7
C–2 = 68,2
C–3 = 42,4
C–4 = 46,0
C–5 = 26,9
C–6 = 36,2
C–7 = 47,3
1-CH_3 = 13,4
7-CH_3 = 20,4/20,1



DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000 THÀNH HUNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM



Hình 4.23 Sơ đồ phổ ^{13}C -NMR.

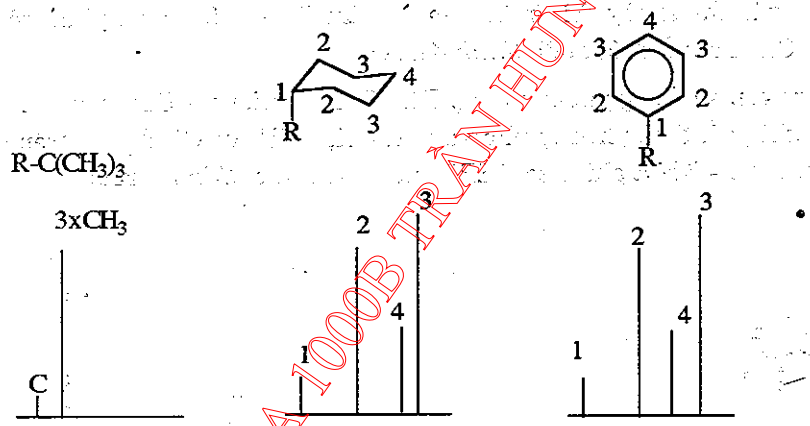
(a) Phổ $^{13}C\{^1H\}$ (b) Phổ APT (c) Phổ DEPT

Cường độ các vạch phổ trong phổ xóa tương tác ^{13}C-^1H tỉ lệ với:

1- Số nguyên tử hidro gắn với nguyên tử cacbon.

2- Số nguyên tử cacbon tương đương.

Thường thì nhóm CH_3 và CH_2 cho cường độ vạch phổ như nhau, nhưng nhóm CH và C cho cường độ yếu hơn. Ví dụ:



Hình 4.24

4.7.3. Độ chuyển dịch hoá học

Vị trí của các tín hiệu cộng hưởng ^{13}C rất quan trọng cho việc xác định cấu tạo các hợp chất. Độ chuyển dịch hoá học ^{13}C nằm trong một vùng rộng hơn nhiều so với phổ CHTN-^1H, từ 0 đến 200 ppm. Hiện nay chất chuẩn thường dùng là TMS, dung môi ghi phổ thường dùng là các chất d_6-axeton, d_6-benzen, d_1-clorofom, d_{12}-xiclohexan, d_6-dimetylsunfoxit, d_4-metanol, tetraclometan...

Độ chuyển dịch hoá học ^{13}C được xác định bởi:

a) Mức độ lai hoá của nguyên tử cacbon.

b) Độ âm điện của các nhóm thế ở nguyên tử cacbon.

Các nhóm thế có ảnh hưởng mạnh đến sự thay đổi vị trí độ chuyển dịch hoá học, ví dụ:

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

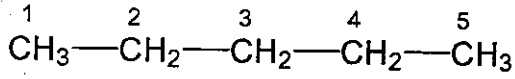
https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

CH_3I	CH_3Br	CH_3Cl	CH_3F
-33	9	24	75 ppm

Ngày nay người ta đã lập được bảng thực nghiệm để tính độ chuyển dịch hoá học của một số hợp chất *(xem bảng 4.4, 4.5, 4.6)*.

Ví dụ 1: Tính giá trị δ (^{13}C) của phân tử n-pentan $CH_3CH_2CH_2CH_2CH_3$. Dựa theo bảng tính với cacbon lai hoá sp^3, tìm các giá trị δ *(xem bảng 4.6)*:

$$\delta = -2,3 + \Sigma A_i$$



C(1) có một α-C, một β-C, một γ-C, một δ-C:

C(1)=-2,3+9,1+9,4-2,5+0,3=14,0 ppm

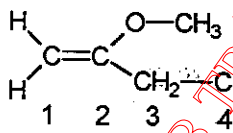
C(2) có hai α-C, một β-C, một γ-C:

C(1)=-2,3+2x9,1+9,4-2,5=22,8 ppm

C(3) có hai α-C, hai β-C:

C(1)=-2,3+2x9,1+2x9,4=34,3 ppm

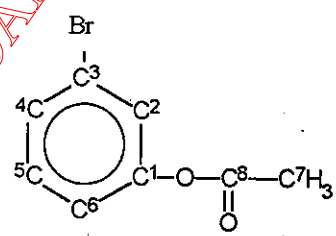
Ví dụ 2: Tính giá trị δ của các nguyên tử ^{13}C trong phân tử dưới đây *(xem bảng 4.7)*.



1.		
cơ sở		123,3
α_π	-O-	-39,0
α_π	$-CH_2-$	-7,9
β_π	-Cl	2,0
β_π	$-CH_3$	-1,8
		76,6
	α_π-α_π	2,5
		79,1 ppm

2.		
cơ sở		123,3
α	-O-	29,0
α	$-CH_2-$	10,6
β	-Cl	-1,0
β	$-CH_3$	7,2
		169,1
	α-α	-4,8
		164,3 ppm

Ví dụ 3: Tính giá trị δ của các nguyên tử ^{13}C trong phân tử dưới đây *(xem bảng 4.9)*.



1.	cơ sở	128,5
C-1.	-O-CO-CH_3	23,0
m.	-Br	1,7
		152,2 ppm

2.	cơ sở	128,5
o.	-O-CO-CH_3	-6,0
o.	-Br	3,4
		125,9 ppm

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÝ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

3. cơ sở	128,5	
C-1. -Br	-5,5	
m. $-O-CO-CH_3$	1,0	
	124,0 ppm	

4. cơ sở	128,5	
o. -Br	3,4	
p. $-O-CO-CH_3$	-2,0	
	129,9 ppm	

5. cơ sở	128,5	
m. $-O-CO-CH_3$	1,0	
m. -Br	1,7	
	131,2 ppm	

6. cơ sở	128,5	
o. $-O-CO-CH_3$	-6,0	
p. -Br	-1,7	
	120,8 ppm	

Ví dụ 4: Tính giá trị δ (^{13}C) của phân tử $C_6H_5-{}^2C\equiv{}^1CH$ *(xem bảng 4.8).*

$$\delta_{C^1} = 41,2 + X_1(H) + X_2(C_6H_5)$$
$$= 41,2 - 18,9 + 55,4 = 77,7 \qquad \text{(TN: 78,3)}$$
$$\delta_{C^2} = 41,2 + X_1(C_6H_5) + X_2(H)$$
$$= 41,2 - 6,9 + 49,4 = 83,7 \qquad \text{(TN: 84,6)}$$

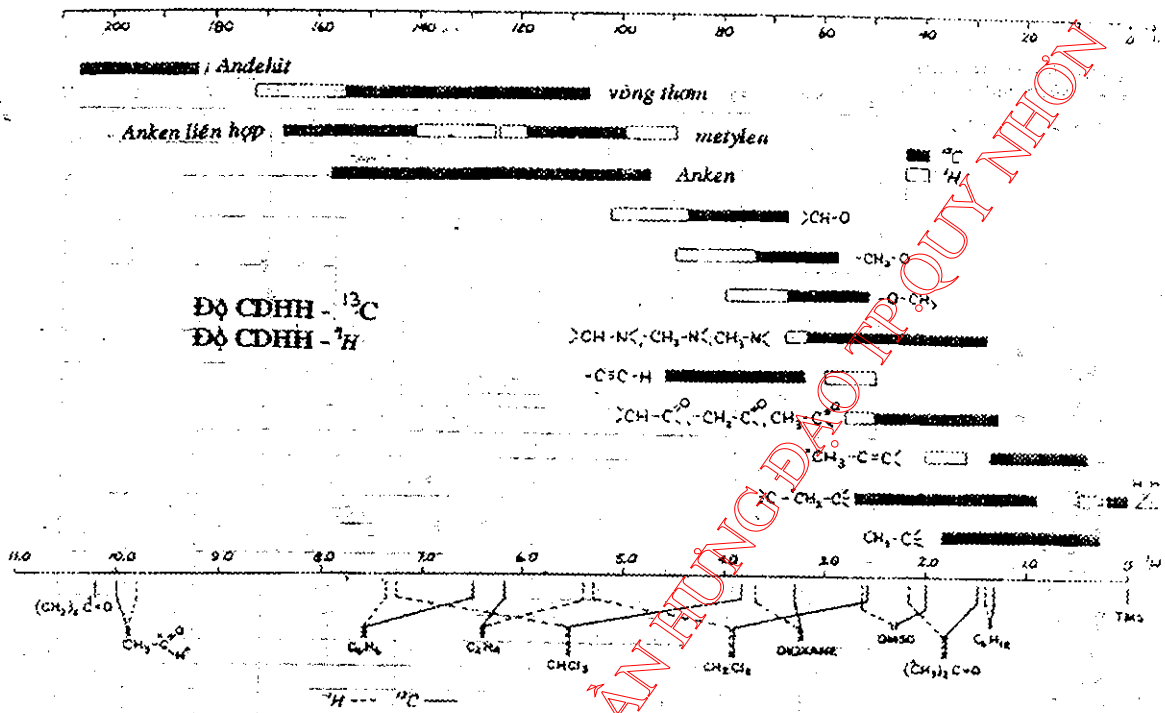
Ví dụ 5: Tính giá trị δ (^{13}C) của phân tử $p\text{-}CH_3OC_6H_4-{}^2C\equiv{}^1C-CH_3$ *(xem bảng 4.6)*

$$\delta_{C^1} = 41,2 + X_1(CH_3) + X_2(CH_3OC_6H_4)$$
$$= 41,2 - 11,2 + 54,3 = 84,3 \qquad \text{(TN: 84,7)}$$
$$\delta_{C^2} = 41,2 + X_1(CH_3OC_6H_4) + X_2(CH_3)$$
$$= 41,2 - 7,0 + 45 = 79,2 \qquad \text{(TN: 80,2)}$$

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP.QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM



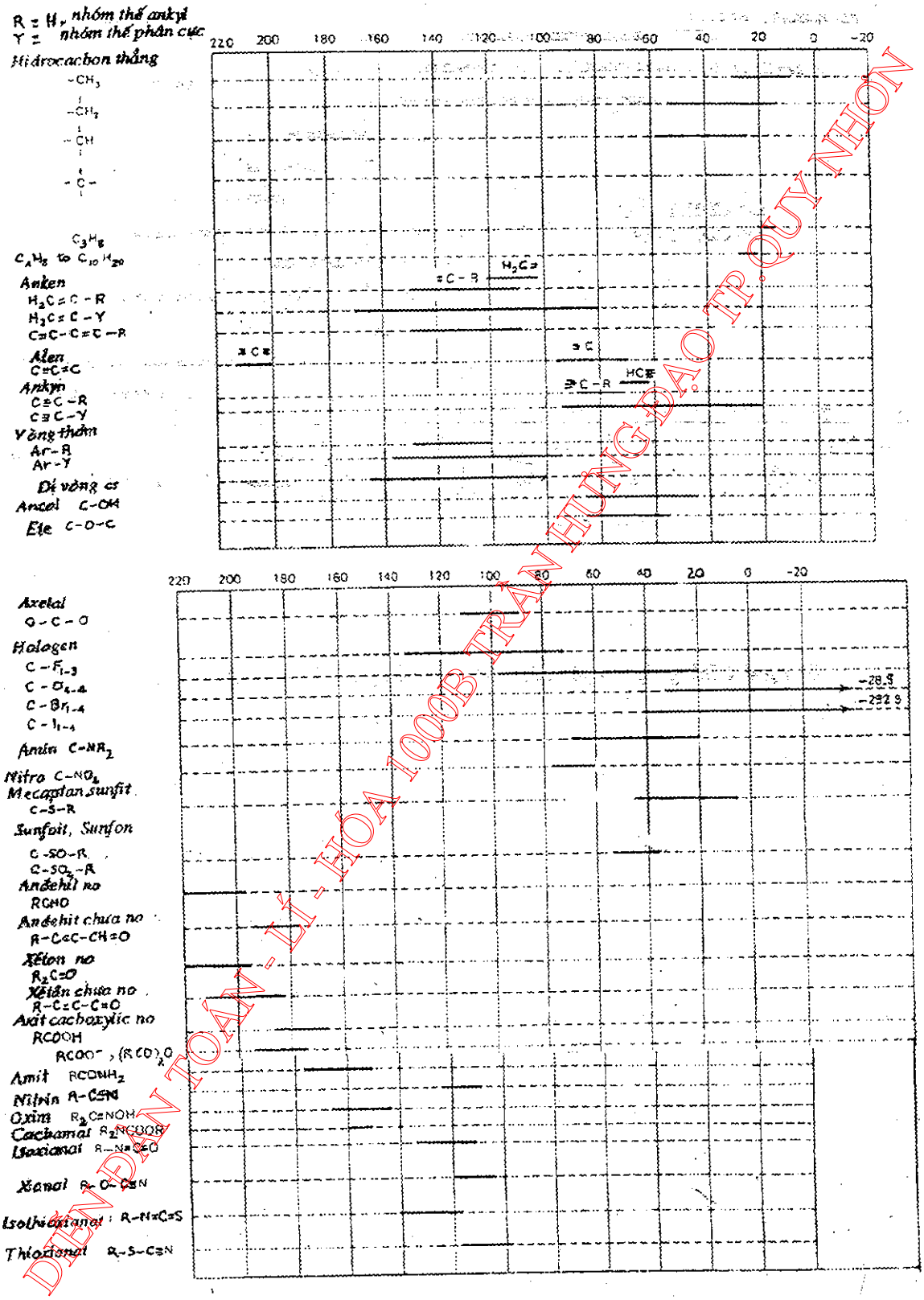
Bảng 4.4 Bảng độ chuyển dịch hóa học của phổ ^{1}H và - ^{13}C - NMR

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 10000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Bảng 4.5. Bảng độ chuyển dịch hóa học của phổ ^{13}C-NMR



DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 10003 TRẦN HƯNG ĐẠO TP QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Bảng 4.6 Bảng tính phổ cộng hưởng từ hạt nhân ^{13}C của cacbon lai hóa sp^3

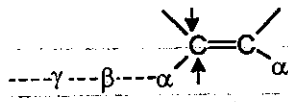
$\delta = -2,3 + \Sigma A_i$

Nhóm thế	α	β	δ	γ
-H	0	0	0	0
-C<	9,1	9,4	-2,5	0,3
-C=C<	21,5	6,9	-2,1	0,4
-C≡C-	4,4	5,6	-3,4	-0,6
$-C_6H_5$	22,1	9,3	-2,6	0,3
-C=C=C<	14,4	5,0	-5,5	0
-CH=O	29,9	-0,6	-2,7	0
-CO-	22,5	3,0	-3,0	0
-COOH	20,1	2,0	-2,8	0
$-COO^-$	24,5	3,5	-2,5	0
-COOR	22,6	2,0	-2,8	0
-CO-N<	22,0	2,6	-3,2	0
-CO-Cl	33,1	2,3	-3,6	0
-C=N-OH (syn-)	11,7	0,6	-1,8	0
-C=N-OH (anti-)	16,1	4,3	-1,5	0
-C≡N	3,1	2,4	-3,3	0
-N≡C	31,5	7,6	-3,0	0
-N<	28,3	11,3	-5,1	0
$-N^+<$	30,7	5,4	-7,2	-1,4
$-NH_3^+$	26,0	7,5	-4,6	0
$-NO_2$	61,6	3,1	-4,6	-0,9
-O-NO	54,3	6,1	-6,5	-0,5
-O-CO	54,5	6,5	-6,0	0
-O-CO	62,5	6,5	-6,0	0
-O-	49,0	10,1	-6,2	0
-F	70,1	7,8	-6,8	0
-Cl	31,0	10,0	-5,1	-0,5
-Br	18,9	11,0	-3,8	-0,7
=I	-7,2	10,9	-1,5	-0,9
-S-	10,6	11,4	-3,6	-0,4
-SO-	31,1	9,0	-3,5	0
-S-CO	17,0	6,5	-3,1	0
-SCN	23,0	9,7	-3,0	0

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 10 03B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

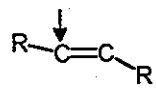
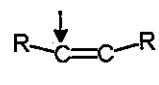
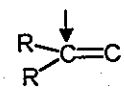
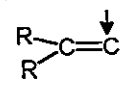
Bảng 4.7 Bảng tính phổ cộng hưởng từ hạt nhân ^{13}C của cacbon lai hoá sp (tiếp)



$\delta = 123,3 + \Sigma A_i + \Sigma A_{xi}$ + *hiệu chỉnh*

γ	β	α	Nhóm thế	α_π	β_π	γ_π
-1.5	7.2	10.6	-C<	-7.9	-1.8	1.5
	6.0	25.7	-OH	-43.3	-1.0	
	2.0	29.0	-OR	-39.0	-1.0	
		18.0	$-O-CO-CH_3$	-27.0		
		15.0	$-CO-CH_3$	6.0		
		13.0	-CHO	13.0		
		4.0	-COOH	9.0		
		6.0	-COOR	7.0		
		13.6	-C=C<	-7.0		
	3.5	12.5	$-C_6H_5$	-11.0	0.2	
		-16.0	-C≡N	15.0		
		-3.9	-N≡C	-2.7		
		22.3	$-NO_2$	-0.9		
		24.9	-F	-34.3		
	-0.4	2.6	-Cl	-6.1	2.0	
	0	-8.0	-Br	-1.0	2.0	
	3.6	-38.0	-I	7.0	3.9	
		4.0	-S-	-12.7		

Hiệu chỉnh:

α----α_π	*(trans)*	0	
α----α_π	*(cis)*	-1,1	
α----α	*(geminal)*	-4,8	
α_π---α_π	*(vicinal)*	2,5	
β----β		2,3	

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Bảng 4.8 Bảng tính độ chuyển dịch hóa học phổ ^{13}C - NMR của các hợp chất kiểu $Y\text{-}C\equiv C\text{-}X$. $\delta\ 41{,}2 + \Sigma X_1 + X_2$

Nhóm thế	X_1	X_2
H	-18,9	49,4
CH_3	-11,2	45,0
C_2H_5	-5,5	45,3
C_4H_9	-5,9	46,1
t-C_4H_9	1,6	43,8
C_6H_5	-6,9	55,4
p-$CH_3OC_6H_4$	-7,0	54,3
p-$CH_3C_6H_4$	-7,1	54,9
p-ClC_6H_4	-8,3	56,4
CH_2=CH	-9,0	56,1
HC≡C	-22,2	42,2
$C(CH_3)_2OH$	-1,5	49,6
$Si(CH_3)_3$	-1,4	72,5
$Si(C_2H_5)_3$	-3,4	73,2
$Ge(CH_3)_3$	-1,4	70,8
$Ge(C_2H_5)_3$	-4,4	72,6
$Sn(CH_3)_3$	-3,3	76,2
$Sn(C_2H_5)_3$	-4,7	76,2
$P(O)(OC_2H_5)_2$	-17,3	66,4
C≡N	-34,9	52,6
CH_3CO	-8,1	56,1
OC_2H_5	-2,8	-2,9
SC_2H_5	-18,4	60,6
COC_6H_5	-10,0	58,7
$(CH_3)_2COH$	-1,6	47,7
CH_2OH	-7,6	51,5

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

Bảng 4.9 Bảng tính phổ cộng hưởng từ hạt nhân ^{13}C của carbon tại hóa sp^2 (vòng benzen).

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

$\delta = 128,5 + \Sigma A_i$

Nhóm thế	C-1	*ortho*	*meta*	*para*
-H	0	0	0	0
$-CH_3$	9.3	0.8	0	-2.9
$-C_2H_5$	15.6	-0.4	0	-2.6
$-C_3H_7$ (iso)	20.2	-2.5	0.1	-2.4
$-C_4H_9$	14.2	-0.2	-0.2	-2.8
$-C_4H_9$ (tert)	22.4	-3.1	-0.1	-2.9
$-CH_2N<$	15.0	-1.5	-0.2	-2.0
$-CH_2OH$	12.0	-1.0	0	-1.0
$-CH_2Cl$	9.1	0	0.2	-0.2
$-CH_2Br$	9.2	0.1	0.4	-0.3
$-CF_3$	-9.0	-2.2	0.3	3.2
$-CH_2CN$	1.6	-0.7	0.5	-0.7
$-CH{=}CH_2$	9.5	-2.0	0.2	-0.5
$-C{\equiv}CH$	-6.1	3.8	0.4	-0.2
$-C_6H_5$	13.0	-1.0	0.4	-1.0
$-C{\equiv}N$	-15.4	3.6	0.6	3.9
-CHO	8.6	1.3	0.6	5.5
$-CO-CH_3$	9.1	0.1	0	4.2
$-CO-C_2H_5$	7.6	-1.5	-1.5	2.4
$-CO-C_3H_7$ (iso)	7.4	-0.5	-0.5	4.0
$-CO-C_4H_9$ (tert)	9.4	-1.1	-1.1	1.7
$-CO-C_6H_5$	9.4	1.7	-0.2	3.6
$-CO-N<$	5.5	-0.5	-1.0	5.0
-CO-Cl	5.0	3.0	1.0	7.0
-COOH	2.1	1.5	0	5.1
$-COOCH_3$	2.1	1.1	0.1	4.5
$-COO^-$	8.0	1.0	0	3.0
-OH	26.9	-12.7	1.4	-7.3
$-OCH_3$	31.4	-14.4	1.0	-7.7
$-O-C_6H_5$	29.0	-9.9	2.0	-5.0
$-O^-$	39.6	-8.2	1.9	-13.6
$-O-CO-CH_3$	23.0	-6.0	1.0	-2.0
$-NH_2$	18.0	-13.3	0.9	-9.8
$-NHCH_3$	21.7	-16.2	0.7	-1.8
$-N(CH_3)_2$	23.0	-16.0	1.0	-12.0
$-N(C_2H_5)_2$	20.0	-15.0	1.0	-12.0
$-N(C_6H_5)_2$	19.0	-4.0	1.0	-6.0
$-NH-CO-CH_3$	11.0	-10.0	0	-6.0
$-N{=}C{=}O$	6.0	-4.0	1.0	-3.0
$-N{=}O$	37.4	-7.7	0.8	7.0
$-NO_2$	20.0	-5.0	1.0	6.0
$-N{\equiv}C$	-1.8	-2.2	1.4	0.9
-F	34.8	-12.9	1.4	-4.5
-Cl	6.2	-0.4	1.3	-1.9
-Br	-5.5	3.4	1.7	-1.7
-I	-31.9	10.1	3.1	0.9
-SH	2.2	0.7	0.4	-3.1
$-SCH_3$	9.9	-2.0	0.5	-4.0
$-SO_3H$	15.0	-2.2	1.3	3.8
$-Si(CH_3)_3$	13.4	-4.4	-1.1	-1.1

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

4.8. Phổ cộng hưởng từ hạt nhân của một số hạt nhân khác

Hơn 200 đồng vị có momen từ, do đó theo nguyên lí có thể nghiên cứu phổ cộng hưởng từ hạt nhân của chúng, nhưng cho đến nay người ta chỉ mới nghiên cứu rộng rãi phổ cộng hưởng từ hạt nhân của một số nguyên tố sau: ^{31}P, ^{19}F, ^{15}N, ^{2}D, ^{11}B, ^{23}Na, ^{29}Si, ^{109}Ag, ^{199}Hg, ^{113}Cd và ^{207}Pb, trong đó phổ biến hơn là ba nguyên tố đầu.

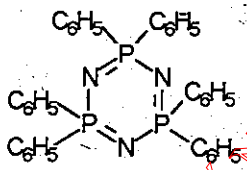
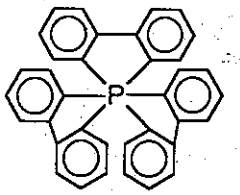
Do trong tự nhiên tỉ lệ tồn tại của một số nguyên tố nhỏ *(xem bảng 4.1)* nên cường độ tín hiệu yếu đòi hỏi các máy có tần số lớn và độ phân giải cao mới đo được. Nhìn chung thang độ chuyển dịch hoá học và hằng số tương tác spin-spin của các hạt nhân này lớn hơn của proton ^{1}H và ^{13}C.

4.8.1. Phổ cộng hưởng từ hạt nhân photpho-31 (^{31}P - NMR)

Photpho-31 có số lượng tử spin I=½, độ chuyển dịch hoá học nằm trong thang rộng 700 ppm. Photpho có chứa trong thành phần adenosin triphotphat nên phổ cộng hưởng từ hạt nhân ^{31}P được sử dụng rộng rãi trong nghiên cứu sinh học.

Bảng 4.8 và 4.9 chỉ ra độ chuyển dịch hoá học và tương tác spin-spin của ^{31}P.

***Bảng 4.10** Độ chuyển dịch hoá học của một số hợp chất chứa ^{31}P (chất chuẩn H_3PO_4 85%).*

Hợp chất	δ (ppm)	Hợp chất	δ (ppm)
PH_2CH_3	-164	$P(C_2H_5)_2Cl$	+81
$PH(CH_3)_2$	-99	$P(OCH_3)_3$	+141
$P(CH_3)_3$	-62	$P(OCH_3)Cl_2$	+181
$P(C_2H_5)_3$	-20	$P[N(CH_3)_2]_3$	-122
$P(C_6H_5)_3$	-6	$O=P(CH_3)_3$	+36
	+211	$O=P(C_6H_5)_3$	+23
	+9		-181

***Bảng 4.11** Hằng số tương tác với ^{31}P (Hz).*

^{31}P - ^{31}P	(-400)- (+750)	$^{1}H-C-C-^{31}P(=O)$	5-15
^{31}P- O - ^{31}P	16-20	$^{1}H-C-C-^{31}P(=S)$	15-20
^{1}H - $^{31}P<$	150-250	^{1}H - C - C - ^{31}P	14-30
$^{1}H-^{31}P(=O)$	500-750	^{19}F - ^{31}P	570-1420
$^{1}H-^{31}P(=S)$	490-630		

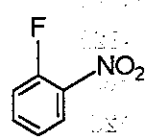
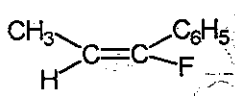
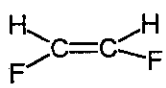
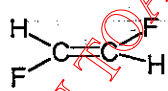
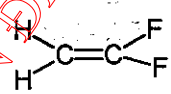
DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Flo-19 có số lượng tử spin I=½ và hằng số từ thẩm gần với hằng số từ thẩm của ^{1}H nên tần số cộng hưởng của ^{19}F tương tự như của ^{1}H trong cùng một từ trường (ở 4,69 T, tần số cộng hưởng của ^{1}H là 200MHz, của ^{19}F là 188MHz). Thang độ chuyển dịch hoá học của ^{19}F là 30 ppm *(xem bảng 4.12)*. Hằng số tương tác spin-spin J_{F-F} từ 0-300Hz, còn J_{F-H} nhỏ hơn 100Hz.

***Bảng 4.12** Độ chuyển dịch hoá học của ^{19}F (chất chuẩn là $CFCl_3$).*

Hợp chất	δ (ppm)
HF	+40
CF_4	-64
CHF_3	-63
C_6H_5-CF_3	-64
C_6H_5-CF_2Cl	-49
$C_6H_5CF_2C_6H_5$	-89
Cl_2CF-$CFCl_2$	-69
C_6H_5F	-116
	-113
C_6F_6	-163
	-103
	-165
	-186
	-185

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO T.P QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

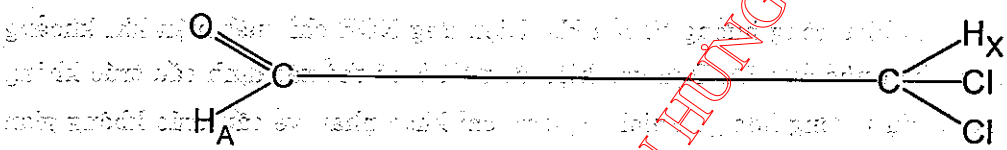
WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

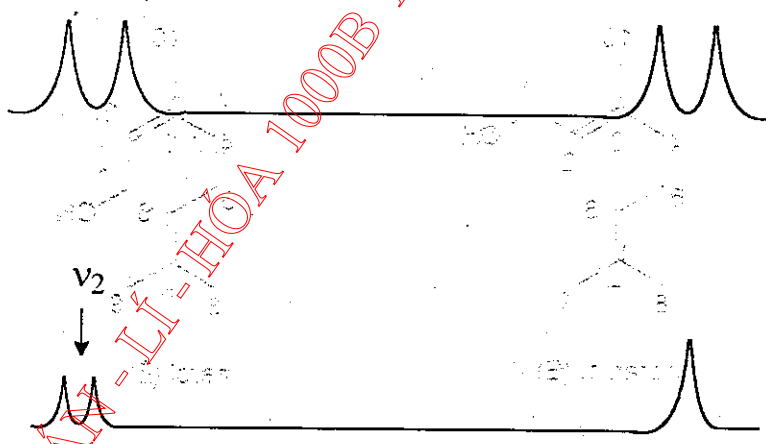
4.9. Một số phương pháp hỗ trợ phân tích phổ cộng hưởng từ hạt nhân

Phân tích phổ cộng hưởng từ hạt nhân của các phân tử hợp chất hữu cơ thường rất phức tạp, để giảm bớt khó khăn người ta đã tìm ra một số phương pháp kĩ thuật để hỗ trợ bên cạnh biện pháp chế tạo các máy có tần số cộng hưởng lớn.

4.9.1. Cộng hưởng từ kép

Khi có hai nhóm hạt nhân tương tác với nhau làm xuất hiện bội vạch, nếu dùng một từ trường có tần số tương ứng với một nhóm tác động vào nhóm đó thì sẽ triệt tiêu tương tác ở nhóm thứ hai, tức là làm mất đi tín hiệu bội ở nhóm này. Phương pháp này gọi là xóa tương tác spin. Ví dụ ở phân tử đicloaxetandehit dưới đây, khi tác dụng từ trường bổ sung tương ứng với tần số ν_2 vào tín hiệu của nhóm H_A thì vạch duplet của nhóm H_X trở thành vạch đơn.





Hình 4.25 Xóa tương tác spin của phân tử đicloaxetandehit.

Ngoài ra, hiện nay người ta còn sử dụng kĩ thuật INDOR (*Inter Nuclear Double Resonance*) để hỗ trợ. Kĩ thuật này cũng dựa trên hiệu ứng cộng hưởng từ kép, nhưng có khả năng hỗ trợ cho phân tích các phổ phức tạp hơn và cho phép xác định dấu tương đối của hằng số tương tác spin-spin.

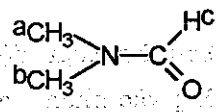
DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

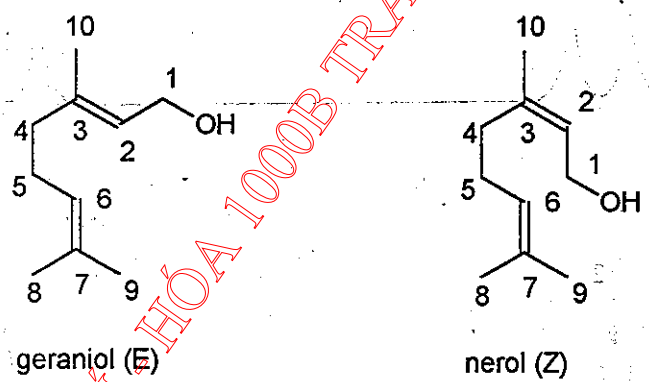
WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

4.9.2.Hiệu ứng NOE

Hiệu ứng NOE (*Nuclear Overhauser Effect*) xuất hiện khi có hai proton không trực tiếp tương tác với nhau nhưng cách nhau một khoảng không gian nhất định. Ví dụ xét phân tử đimetylfomamit dưới đây:



Khi chiếu tần số cộng hưởng vào proton nhóm $^{a}CH_3$ thì thấy tín hiệu của proton H_C ở nhóm andehit lớn lên, nhưng khi chiếu tần số cộng hưởng vào proton của nhóm $^{b}CH_3$ thì tín hiệu của H_C không thay đổi, nguyên nhân là nhóm $^{b}CH_3$ ở xa H_C hơn nhóm $^{a}CH_3$ nên không gây ảnh hưởng đến tín hiệu cộng hưởng từ của H_C. Hiệu ứng NOE chỉ xuất hiện khi khoảng cách hai proton xa nhau nhỏ hơn 3Å. Dựa vào hiệu ứng NOE có thể xác định cấu trúc không gian của phân tử. Ví dụ trường hợp geraniol và nerol chỉ khác nhau về cấu trúc không gian của nối đôi giữa dạng E (geraniol) và dạng Z (nerol). Ứng dụng hiệu ứng NOE trong phổ cộng hưởng từ nhân proton có thể chứng minh được sự khác nhau trên.

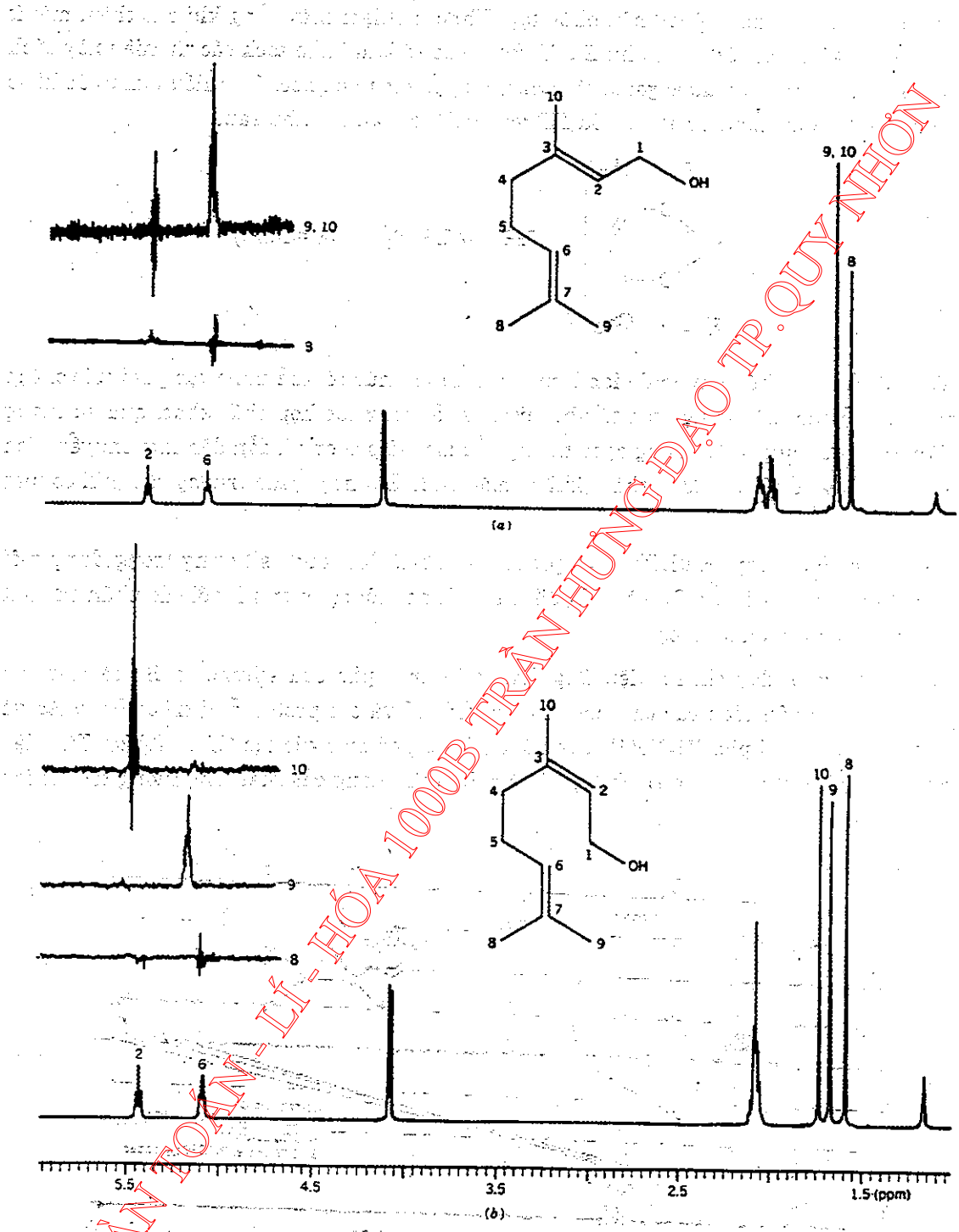


Trên phổ ^{1}H-NMR của geraniol (*hình 4.26),* khi tác dụng một từ trường bổ sung vào vị trí tín hiệu của proton 9, 10 thì thấy chỉ có tín hiệu của proton 6 tăng lên vì proton 6 ở gần nhóm metyl 9, còn trên phổ của nerol thấy khi tác động vào nhóm metyl 10 thì tín hiệu của proton ở vị trí 2 tăng, còn khi tác động vào tín hiệu ở vị trí 9 thì tín hiệu của proton 6 cũng tăng lên bởi vì proton 2 nằm gần nhóm metyl 10, còn proton 6 ở gần nhóm metyl 9.

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM



Hình 4.26. Hiệu ứng NOE trên phổ ^{1}H-NMR của geraniol (a) và nerol (b).

4.9.3. Tác nhân chuyển dịch hoá học

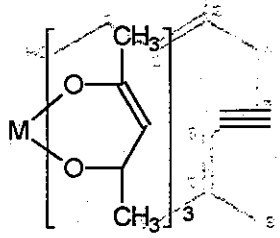
Trong các phổ cộng hưởng từ hạt nhân thường có tín hiệu cộng hưởng của một proton

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

xen phủ lẫn nhau làm cho phổ trở nên phức tạp. Thực nghiệm thấy rằng khi cho thêm một ít phức của một số kim loại đất hiếm như Eu, Y, Pr,... vào sẽ làm phân tách các tín hiệu này cách xa nhau hơn. Các phức này được gọi là tác nhân chuyển dịch hoá học. Có nhiều loại phức khác nhau, ví dụ phức dipivalometanat của Eu(III) và Pr(III) có cấu tạo như sau:

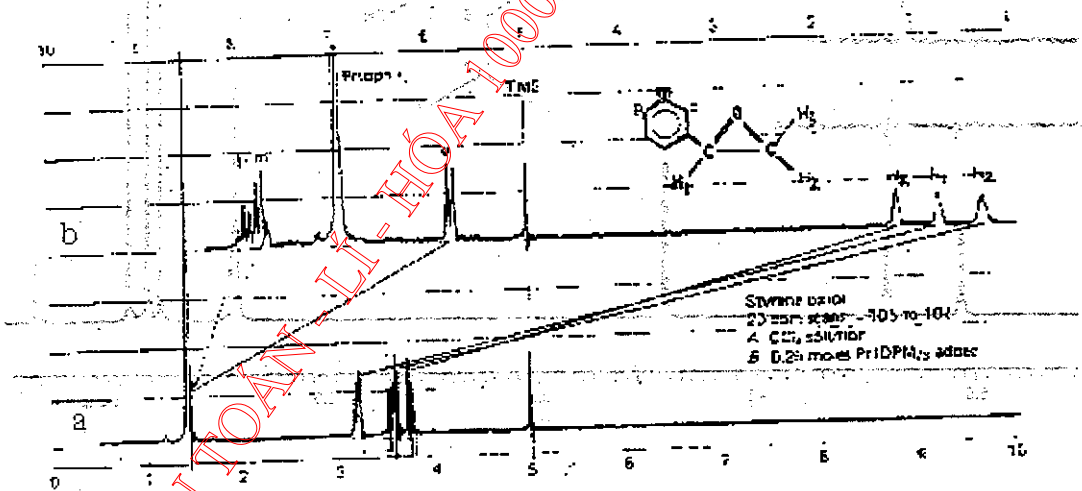


M(DPM)$_3$ (M=Eu,Pr)

Vai trò của các phức này là do ion kim loại ở dạng phức có khả năng tạo phối trí với cặp electron riêng lẻ của một số nguyên tố như nitơ, oxi ở trong các hợp chất khác, qua sự tương tác đã làm thay đổi mức năng lượng cộng hưởng của một số proton và dẫn đến làm chuyển dịch tần số cộng hưởng về phía trường thấp (khi có mặt phức Eu) hoặc phía trường cao (khi có mặt phức Pr).

Các phức của europi Eu(DPM)$_3$ và praseodim Pr(DPM)$_3$ được sử dụng trong dung môi không phân cực như CCl_4, $CDCl_3$ và C_6D_6 để tránh dung môi cạnh tranh với các phân tử chất mẫu khi tương tác với ion kim loại.

Hình 4.27 dưới đây chỉ ra hiệu ứng Pr(DPM)$_3$ trên phổ của stirenoxit. Sự có mặt của phức trên đã làm phân tách các tín hiệu của ^1H, ^2H, ^3H và các proton ở vị trí *ortho*, *meta* và *para (hình 4.27b)* so với phổ ^{1}H-NMR của nó khi không có mặt xúc tác *(hình 4.27a)*. Tín hiệu của proton ở vị trí *ortho* tách xa ra chứng tỏ nó chịu ảnh hưởng của hiệu ứng tương tác với ion phức mạnh hơn.



***Hình 4.27** Hiệu ứng Pr(DPM)$_3$ trên phổ CHTN-^{1}H của stirenoxit.*

DIỄN ĐÀN TOÁN LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP QUY NHƠN

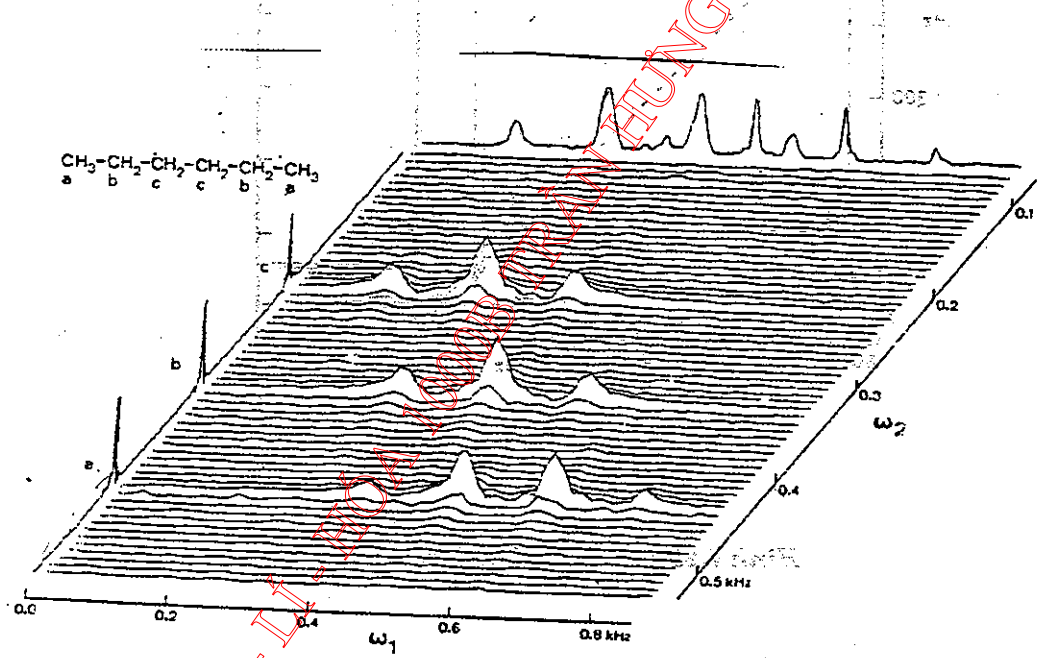
https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

4.10. Phổ cộng hưởng từ hạt nhân hai chiều

Phổ cộng hưởng từ hạt nhân hai chiều là một tiến bộ mới của phương pháp phổ cộng hưởng từ hạt nhân dựa trên kĩ thuật biến đổi Fourier các thông số T_1 và T_2 qua việc tác dụng các xung 90° vào hệ spin, kết quả là tạo ra tín hiệu cảm ứng tự do tắt dần (FID), rồi nhờ phép biến đổi Fourier đã biến hàm $f(T_1,T_2)$ thành hàm $f(T_1,\omega_2)$ và thành hàm $f(\omega_1,\omega_2)$. Các giá trị ω_1 và ω_2 liên quan đến độ chuyển dịch hoá học δ và hằng số tương tác J. Chúng được biểu diễn trên một hệ tọa độ vuông góc thể hiện mối liên quan giữa ω_1 và ω_2 hoặc giữa δ và J (kí hiệu là phổ 2D-J), còn ở phổ cộng hưởng từ hạt nhân, trước đây giá trị δ và J được biểu diễn trên một trục nằm ngang (gọi là phổ một chiều kí hiệu 1D).

Trên hình 4.28 chỉ ra phổ cộng hưởng từ hạt nhân ^{13}C hai chiều liên quan giữa δ (ω_2) và J(ω_1) của n-hexan. Trên trục ω_2 thấy rõ vị trí δ của các nhóm a, b và c và trên trục ω_1 là giá trị hằng số tương tác spin-spin J; còn ở phía trên là phổ ^{13}C - NMR một chiều (1D) của hợp chất trên.



Hình 4.28. Sơ đồ phổ ^{13}C - NMR của n-hexan.

Mối liên quan giữa ω_1 và ω_2 cũng có thể là mối liên quan giữa độ chuyển dịch hoá học của một loại hạt nhân trong cùng phân tử, ví dụ phổ $^1H,^1H$-COSY hoặc của hai loại hạt nhân khác nhau trong cùng một phân tử, ví dụ phổ $^1H,^{13}C$-COSY. Đối với phổ $^1H,^1H$-COSY, tín hiệu xuất hiện trên hai phổ sẽ giao nhau ở đường chéo của hình vuông. Khi có hai nhóm tương tác với nhau, ở phổ $^1H,^1H$-COSY sẽ tạo ra hình vuông mà 2 đỉnh nằm trên đường chéo, còn 2 đỉnh còn lại nằm ở ngoài. Ví dụ ở phổ $^1H,^1H$-COSY của 2-butanol quan sát thấy sự tương tác A-B, B-D và C-D được chỉ ra ở 3 nửa hình vuông *AABB*, *BBCC* và *CCDD* *(xem hình 4.29)*. Chính

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

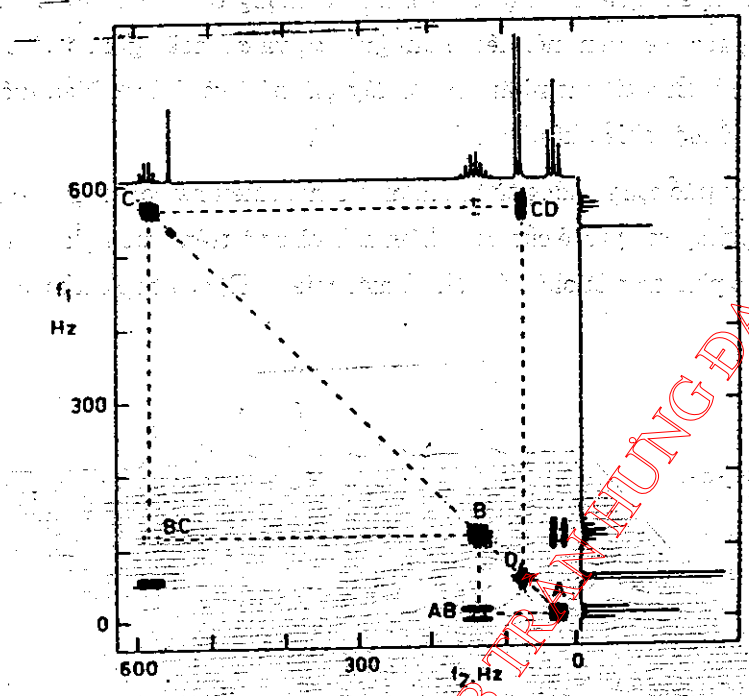
https://tieulun.hopto.org

Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú

WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

dựa vào các hình vuông này ta có thể tìm thấy sự tương tác giữa các nhóm để có thể xác lập bộ khung của phân tử rồi suy ra công thức cấu tạo của nó.



Hình 4.29 Phổ ^1H,^1H-COSY của 2-butanol.

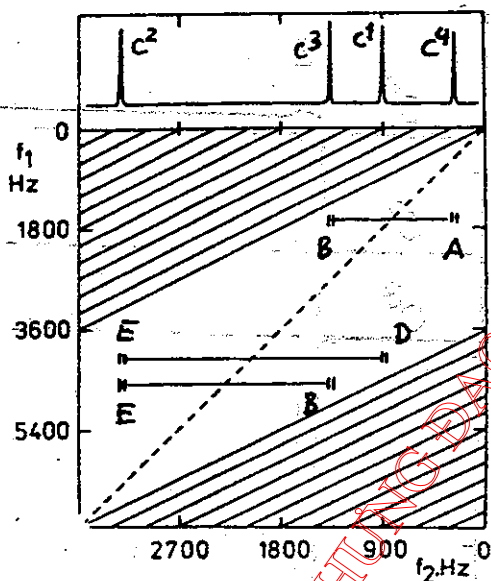
Mối liên quan giữa các nhóm hạt nhân từ tương tác với nhau trong phân tử còn được xác định qua phổ 2D-INADEQUATE. Theo phổ này thì tín hiệu của các nhóm tương tác với nhau thể hiện ra ở hai nhóm vạch chấm nằm trong hệ tọa độ hình vuông mà đường chéo của hình vuông đi qua tâm điểm của hai nhóm vạch đó. Ví dụ, trên hình 4.30 thể hiện phổ 2D-INADEQUATE và phổ 1D-^{13}C-NMR của 2-butanol. Trên phổ thấy rõ sự tương tác của các nhóm A-B, B-E và D-E có tín hiệu nằm ở hai phía của đường chéo hình vuông mà hai cạnh là ω_1 và ω_2.

Phổ 2D-INADEQUATE thể hiện đơn giản giúp ta tìm ra nhanh chóng các nhóm tương tác với nhau trong phân tử từ các tín hiệu nằm trên phổ, nhờ đó có thể xác định cấu trúc của phân tử dễ dàng hơn.

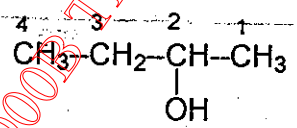
DIỄN ĐÀN TOÁN LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM



Hình 4.30 Phổ 2D-INADEQUATE và phổ 1D-^{13}C-NMR của 2-butanol.

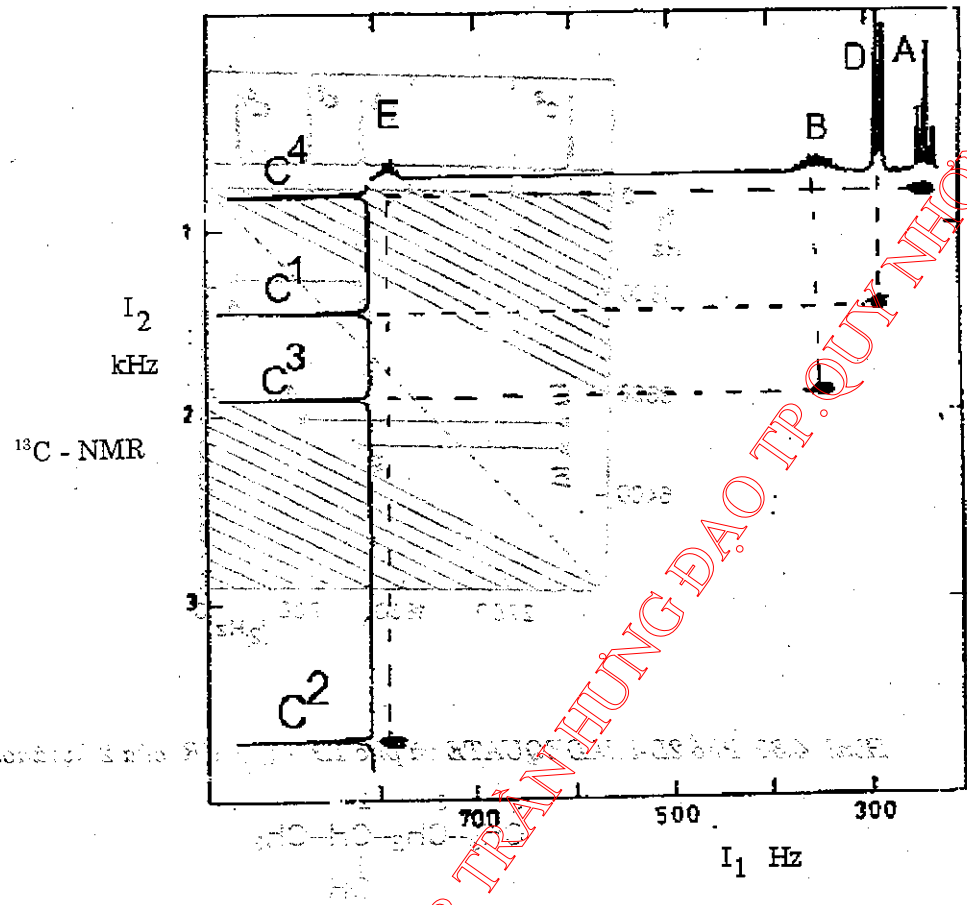


Ngoài ra, mối liên quan ω_1, ω_2 cũng thể hiện ra ở mối liên quan giữa độ chuyển dịch hoá học δ của hai loại hạt nhân khác nhau như phổ ^{1}H,^{13}C-HETERO-COSY.

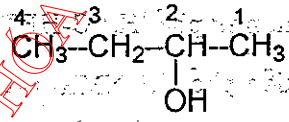
Trên phổ này, một trục biểu diễn phổ ^{1}H-NMR, còn trục kia biểu diễn phổ ^{13}C-NMR. Tín hiệu ^{13}C ở trên phổ ^{13}C-NMR và tín hiệu ^{1}H của chính nguyên tử C đó ở phổ ^{1}H-NMR chiếu xuống hệ tọa độ sẽ có một điểm giao nhau. Ví dụ phổ ^{1}H,^{13}C-COSY của 2-butanol *(hình 4.31)*, trên phổ thấy có sự giao nhau của H_A-C_4, H_B-C_3, H_E-C_2 và H_D-C_1. Từ phổ này giúp ta tìm được vị trí tín hiệu phổ tương ứng với mỗi nhóm trong phân tử, và thiết lập được công thức cấu tạo của nó thuận lợi hơn. Loại phổ ^{1}H,^{13}C-COSY còn được kí hiệu là ^{1}H,^{13}C-HETERO-COSY.

DIỄN ĐÀN TOÁN LÍ - HÓA 10001 TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON



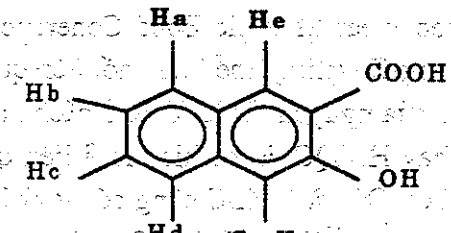
Hình 4.31 Phổ ^{1}H,^{13}C-HETERO-COSY của 2-butanol.

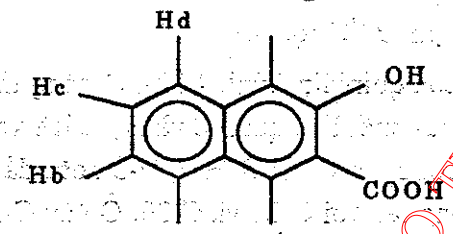


Phổ 2D - NOESY là phổ hai chiều thể hiện sự tương tác của các proton nằm trên các nguyên tử cacbon ở cách xa nhau nhưng có khoảng cách không gian giữa chúng nhỏ hơn 4Å. Cũng giống như phổ ^{1}H, ^{1}H - COSY tín hiệu của các proton tương tác nằm ở bốn đỉnh hình vuông, trong đó hai đỉnh chéo nhau nằm trên đường chéo hình vuông của phổ. Ví dụ phổ 2D - NOESY (*hình 4.32*) của axit pamoic chỉ ra sự tương tác của hai proton Ha và He bằng các tín hiệu trên bốn đỉnh hình vuông aa'ee', trong đó hai đỉnh a và e nằm trên đường chéo hình vuông của phổ. Nó tương tự như các tín hiệu của hai proton Hc và Hb tương tác với nhau nằm trên bốn đỉnh của hình vuông bb'cc'. Như vậy, trên phổ NOESY vẫn phát hiện được tín hiệu của các proton liền nhau tương tác với nhau như trong phổ ^{1}H, ^{1}H - COSY.

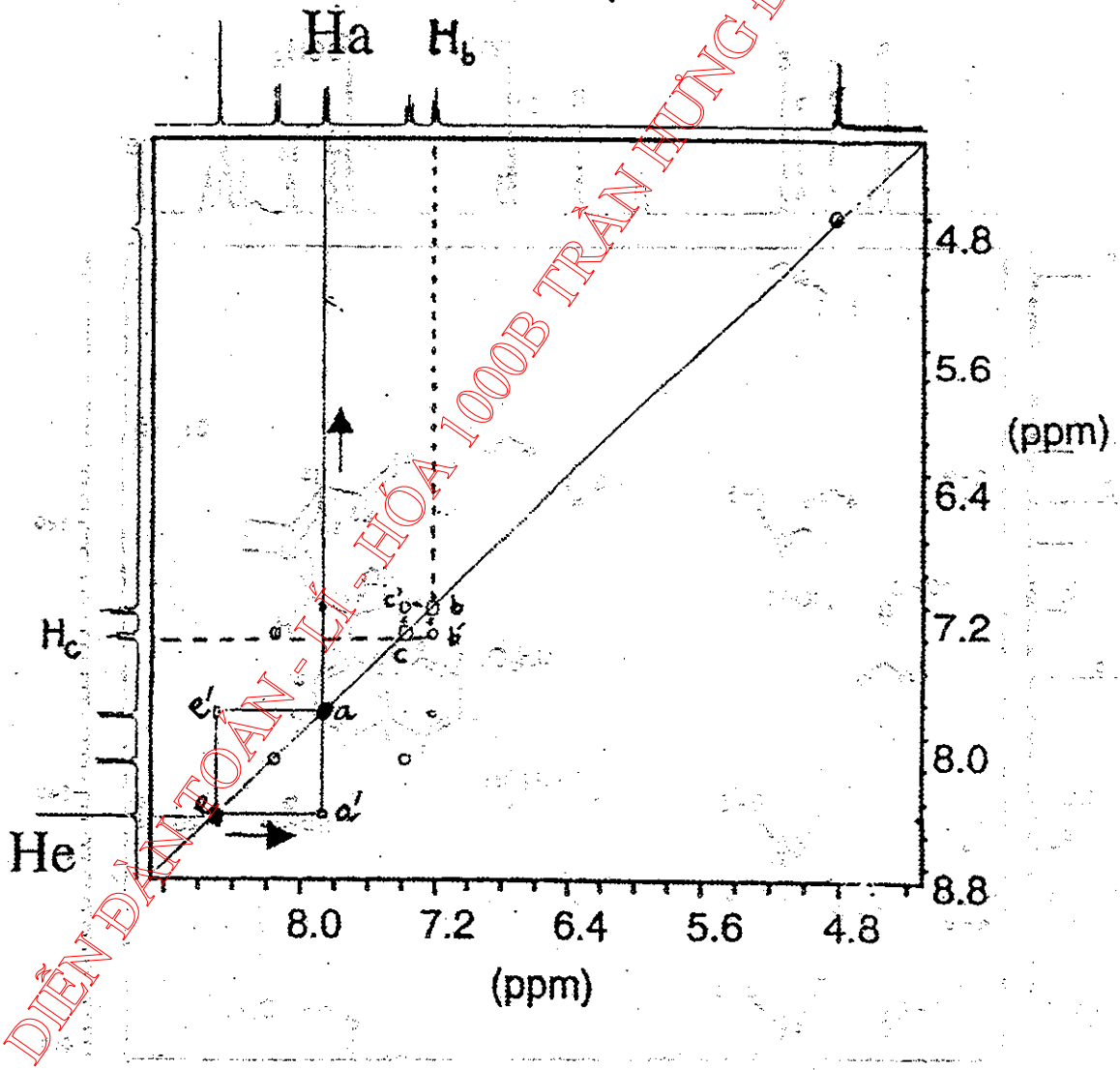
DIỄN ĐÀN TOÁN LÍ - HÓA 100B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON





Axit pamoic



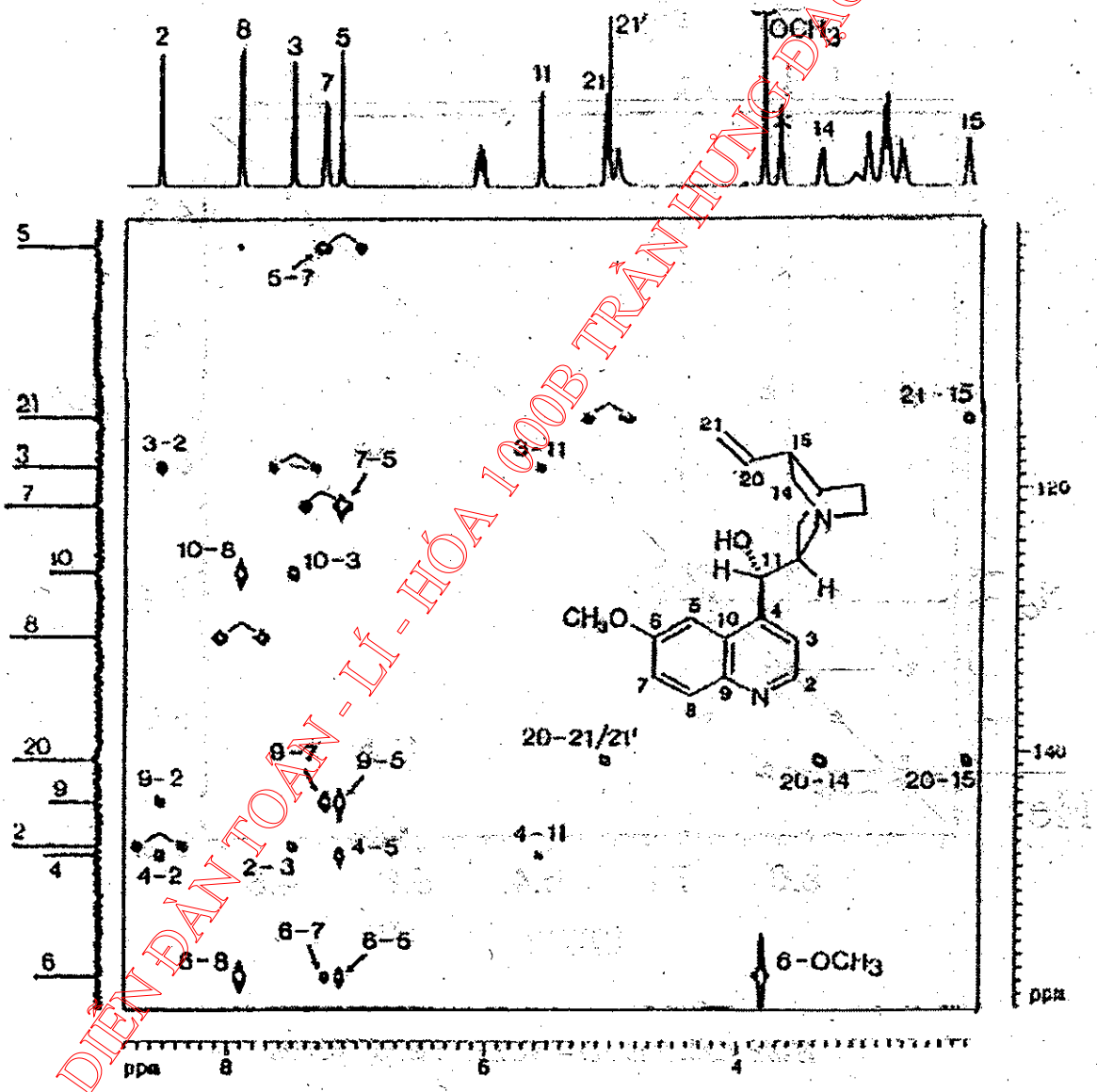
Hình 4.32. Phổ 2D – NOESY của axit pamoi

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÝ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Phổ HMBC (Heteronuclear Multiple Bond Coherence) và phổ COLOC (Correlation spectroscopy for Long-Rang Coupling) thể hiện mối liên quan của tín hiệu proton ^{1}H ở một nguyên tử ^{13}C với tín hiệu của nguyên tử ^{13}C khác ở cách xa nó 2, 3 liên kết là tương tác xa khác với phổ HETCOR hay HMQC là thể hiện mối liên quan của ^{1}H và ^{13}C liên kết trực tiếp với nhau. Giữa phổ COLOC và HMBC cũng có sự khác biệt, phổ HMBC thể hiện mối tương tác của ^{1}H với nguyên tử ^{13}C bậc 2, bậc 3 và bậc 4, còn phổ COLOC thể hiện mối tương tác của ^{1}H với nguyên tử ^{13}C bậc 4.

Ví dụ phổ HMBC của quiniđin (hình 4.33), từ công thức và đọc trên phổ có thể nhận ra một cách không khó khăn mối liên quan C và H ở cách xa nhau, chẳng hạn C-9 tương tác với H-2, H-7, H-5; C-6 tương tác với H-8, H-7, H-5 hoặc đảo lại thấy H-7 tương tác với C-5, C-9 và C-6 hay H-15 tương tác với C-21 và C-20. Ở đây C-21 là C bậc 2, C-5 và C-20 là C bậc 3 còn C-9 là C bậc 4.

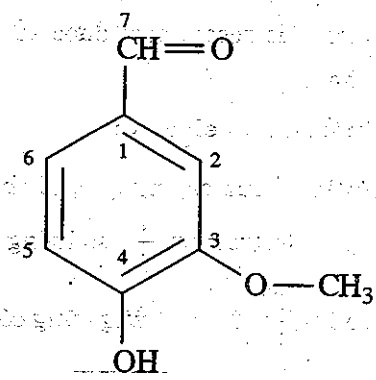


Hình 4.33. Phổ HMBC của quiniđin (500Mz)

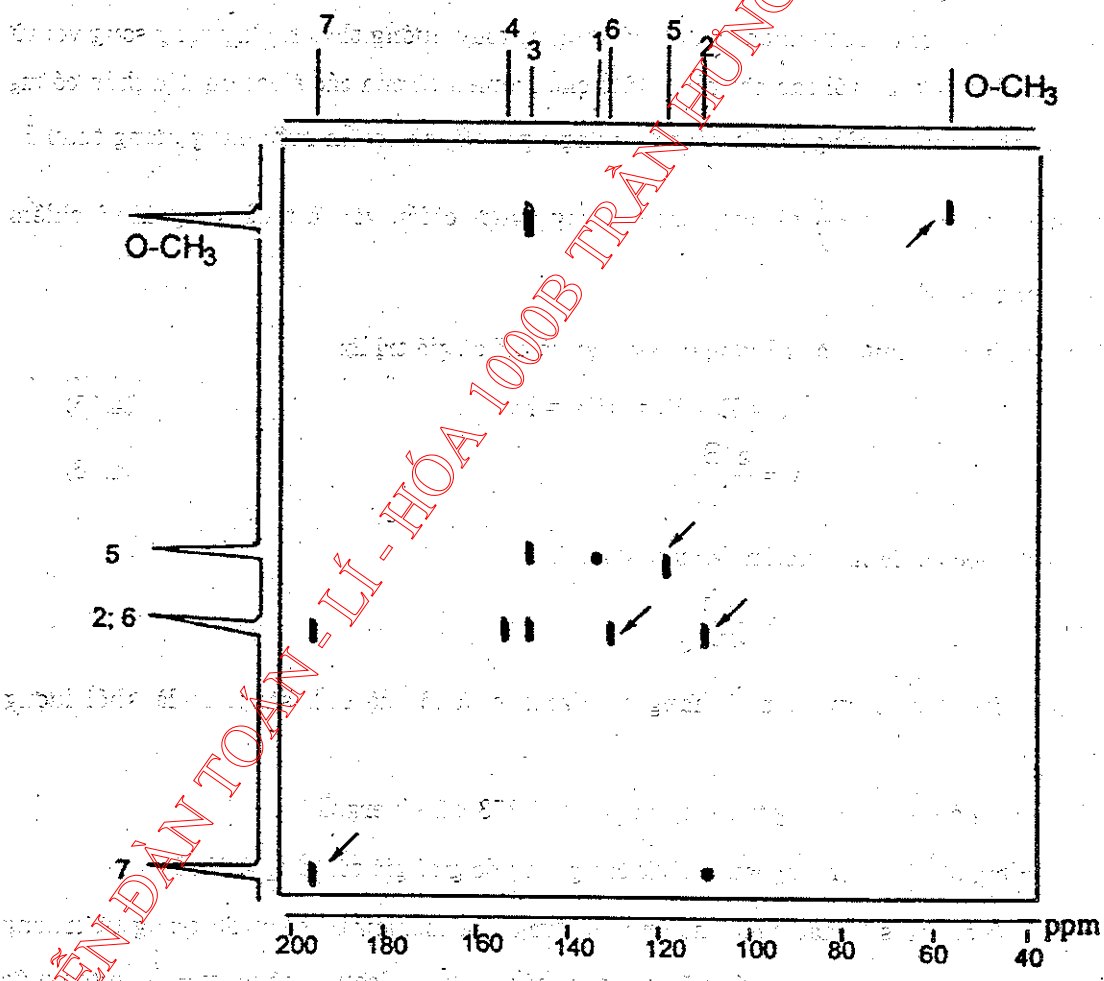
DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN
https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Hình 4.34 chỉ ra phổ COLOC của vanalin, trên phổ thấy rõ sự tương tác của ^5H với ^1C và ^4C, ^2H với ^3C và ^4C, O–CH_3 với ^3C trong đó 1C, ^3C và ^4C đều là C bậc 4.



Vanilin



Hình 4.34. Phổ COLOC của vanilin

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org

Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú

WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

4.11. Phương pháp phổ cộng hưởng spin electron

Phổ cộng hưởng spin electron (ESR, Electron spin resonance) hay phổ cộng hưởng thuận từ electron (EPR, Electron paramagnetic resonance) được sử dụng để nghiên cứu nguyên tử hay phân tử có chứa electron độc thân.

4.11.1. Năng lượng cộng hưởng của electron.

Các gốc tự do cũng như nguyên tử của các nguyên tố chuyển tiếp đều chứa electron độc thân. Các electron có số lượng tử spin electron $s = \frac{1}{2}$, số lượng từ $m_s = +\frac{1}{2}$ và $-\frac{1}{2}$ nên cũng thể hiện tính từ giống như hạt nhân có $I = \frac{1}{2}$; tức là chúng cũng có momen từ μ_S với:

$$\mu_s = g\sqrt{s(s+1)}\,\beta \qquad (4.14)$$

Ở đây g được gọi là yếu tố g của electron, β là manheton Bohr. Khi đặt các electron độc thân vào từ trường ngoài thì momen từ của nó cũng bị xoay hướng theo hướng song song với từ trường ngoài, nhưng khác với các hạt nhân từ ở chỗ momen từ của các electron độc thân có $m_S = -\frac{1}{2}$ sẽ quay theo hướng cùng chiều với từ trường ngoài B_o và chiếm mức năng lượng thấp E_1 còn các momen từ có $m_S = +\frac{1}{2}$ sẽ quay theo hướng ngược chiều với từ trường ngoài và chiếm mức năng lượng cao E_2.

Hiệu số giữa hai mức năng lượng đó ký hiệu là ΔE có giá trị là:

$$\Delta E = E_2 - E_1 = g\beta B_o = h\nu \qquad (4.15)$$

do đó:

$$\nu = \frac{g\beta B_o}{h} \qquad (4.16)$$

Ở đây β được gọi là manheton Bohr có giá trị:

$$\beta = \frac{eh}{4\Gamma Imc}$$

với e là điện tích của electron, h là hằng số plank, c là tốc độ ánh sáng, m là khối lượng electron.

Thay các giá trị tương ứng vào tính được $\beta = 9{,}273 \times 10^{-21}$ erg.G^{-1}

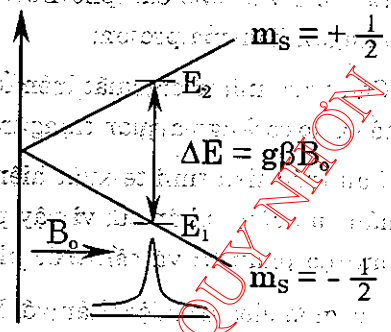
B_o là cường độ từ trường ngoài, đối với các gốc tự do g có giá trị bằng 2,0023.

Hình 4.35 chỉ ra sự phân tách mức năng lượng của momen từ electron trong từ trường ngoài, electron có $m_s = -\frac{1}{2}$ chiếm mức năng lượng thấp E_1, còn electron có $m_2 = +\frac{1}{2}$ chiếm mức năng lượng cao E_2.

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM



Hình 4.35. Sơ đồ phân tách mức năng lượng của momen từ electron trong từ trường B_o.

ΔE được gọi là năng lượng cộng hưởng và ν được gọi là tần số cộng hưởng của electron độc thân. Cần chú ý là các giá trị ΔE và ν chỉ xuất hiện khi có mặt electron độc thân trong nguyên tử hay phân tử. Tương tự các hạt nhân từ trong từ trường ngoài tỉ lệ giữa các electron độc thân chiếm mức năng lượng cao và chiếm mức năng lượng thấp trong từ trường ngoài cũng tuân theo sự phân bố Boltzman. Nếu gọi N^+ là số hạt electron chiếm mức năng lượng cao và N^- là số hạt electron chiếm mức năng lượng thấp thì ta có tỉ số:

$$\frac{N^+}{N^-} = e^{-\Delta E/kT} \qquad (4.17)$$

Ở đây ΔE là hiệu số giữa hai mức năng lượng, T là nhiệt độ tuyệt đối còn K là hằng số Boltzman.

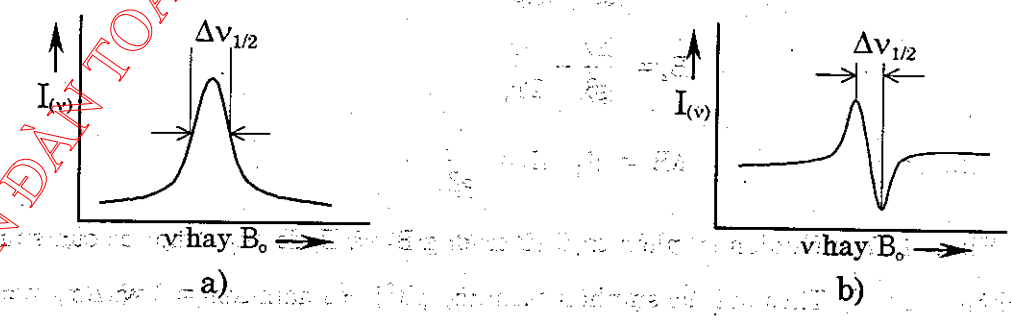
4.11.2. Cấu trúc của phổ ESR.

Phổ cộng hưởng spin electron được xác định qua các thông số:

1. Yếu tố g.
2. Bề rộng vân phổ.
3. Cấu trúc siêu tinh tế.
4. Cấu trúc tinh tế.

Yếu tố g của các electron tự do có giá trị g = 2,0023, còn các electron độc thân trong phân tử có yếu tố g nằm trong khoảng từ 1 đến 6. Đối với các tinh thể yếu tố g của chúng còn phụ thuộc vào sự định hướng của trục tinh thể với hướng từ trường ngoài B_o.

Bề rộng vân phổ được xác định là bề rộng một nửa vân hấp thụ $\Delta\nu_{1/2}$ hay là khoảng cách ngắn nhất giữa hai điểm cực đại và cực tiểu gần nhau của phổ đường cong đạo hàm (*hình 4.36*).



Hình 4.36. Đường cong hấp thụ (a) và đường cong đạo hàm (b) của phổ ESR. $I_{(\nu)}$ là cường độ tín hiệu phổ, $\Delta\nu_{1/2}$ là bề rộng vân phổ.

DIỄN ĐÀN TOÁN LÝ HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Bề rộng vân phổ của phổ ESR lớn hơn của phổ ^{1}H-NMR do thời gian hồi phục spin của electron ngắn hơn của proton.

Cấu trúc tinh tế chỉ xuất hiện ở những phân tử có chứa nhiều electron độc thân như trong tinh thể và nó có ý nghĩa quan trọng trong nghiên cứu vật lí chất rắn hơn là trong hóa học.

Cấu trúc siêu tinh tế xuất hiện do sự tương tác giữa spin của electron độc thân với spin hạt nhân của cùng phân tử; vì vậy phổ cấu trúc siêu tinh tế thể hiện mối liên quan chặt chẽ giữa cấu tạo phân tử và cấu trúc phổ. Thông thường cấu trúc siêu tinh tế xuất hiện qua sự tương tác giữa electron độc thân với hạt nhân proton ^{1}H; ^{19}F ($I = \frac{1}{2}$); ^{14}N ($I = 1$).

Hằng số tương tác siêu tinh tế của electron độc thân với spin hạt nhân có dạng:

$$AIS$$

Ở đây A là hằng số tương tác, I là số lượng tử spin hạt nhân và S là số lượng tử spin electron. Đối với hạt nhân có $I = \frac{1}{2}$ có hai số lượng tử từ là $m_I = +\frac{1}{2}$ và $m_I = -\frac{1}{2}$, còn electron cũng có $S = \frac{1}{2}$ nên có hai số lượng tử từ $m_S = +\frac{1}{2}$ và $m_S = -\frac{1}{2}$. Do sự tương tác này nên ở đây năng lượng cộng hưởng của electron phân tách thành hai mức:

$$\Delta E_1 = g\beta B_o - \frac{A}{2} = h\nu_1 \qquad (4.18)$$

$$\Delta E_2 = g\beta B_o + \frac{A}{2} = h\nu_2 \qquad (4.19)$$

Để giữ tần số cộng hưởng của electron không thay đổi cần phải thay đổi cường độ từ trường Bo, do đó phương trình (4.18) và (4.19) có thể viết:

$$h\nu = g\beta B_1 + \frac{A}{2} \qquad (4.20)$$

và

$$h\nu = g\beta B_2 - \frac{A}{2} \qquad (4.21)$$

Từ hai phương trình trên có thể biến đổi thành:

$$B_1 = \frac{h\nu}{g\beta} - \frac{A}{2g\beta} \qquad (4.22)$$

$$B_2 = \frac{h\nu}{g\beta} + \frac{A}{2g\beta} \qquad (4.23)$$

Rút ra

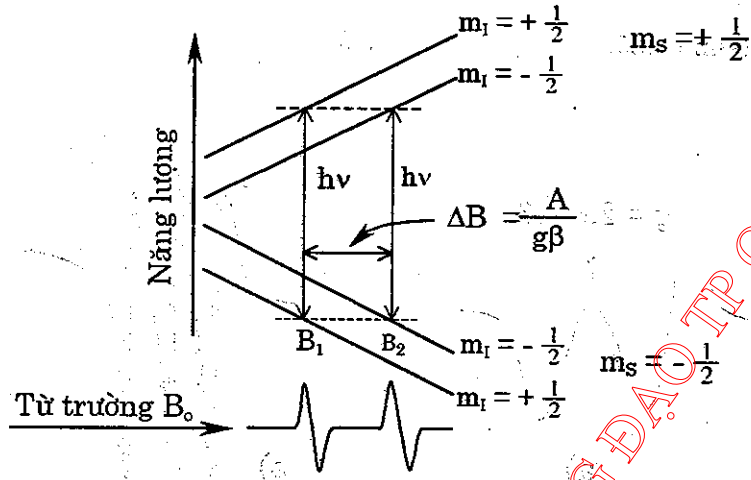
$$\Delta B = B_2 - B_1 = \frac{A}{g\beta}$$

Hình 4.37 biểu diễn sự phân tách từ trường B_1 và B_2 do sự tương tác của spin electron hạt nhân có $I = \frac{1}{2}$. Theo qui tắc sự phân tách này phải bảo đảm $\Delta m_I = 0$ và $\Delta m_S = \pm 1$. Tương ứng với hai giá trị từ trường B_1 và B_2 cũng nhận được hai tín hiệu phổ ESR bởi vì ở đây phổ

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

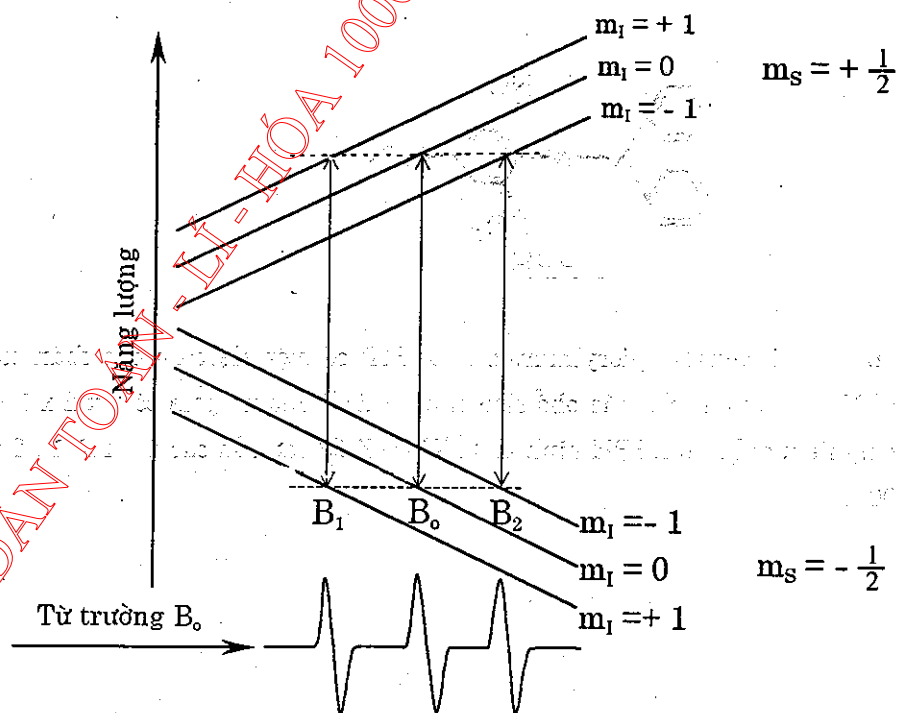
https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

được ghi theo phương pháp quét trường, nó khác với phổ NMR được ghi theo phương pháp quét tần số và giá trị từ trường B được tính theo đơn vị gaus (G).



Hình 4.37 Sơ đồ phân tách cường độ từ trường khi có tương tác spin electron với spin hạt nhân $I = \frac{1}{2}$ (^1H).

Trường hợp spin electron tương tác với spin hạt nhân có I = 1 (^{14}N) sẽ phân tách thành 3 mức từ trường B_1, B_o và B_2. Sự phân tách này là do tuân theo qui tắc số mức bội bằng 2I + 1, cho nên khi I = 1 có 2 x 1 + 1 = 3 mức. Từ đó cũng xuất hiện ba tín hiệu trên phổ ESR tương ứng (*hình 4.38*) do sự tương tác của spin electron với spin hạt nhân có I = 1. Theo qui tắc, sự phân tách này phải bảo đảm $\Delta m_I = 0$ và $\Delta m_S = \pm 1$.



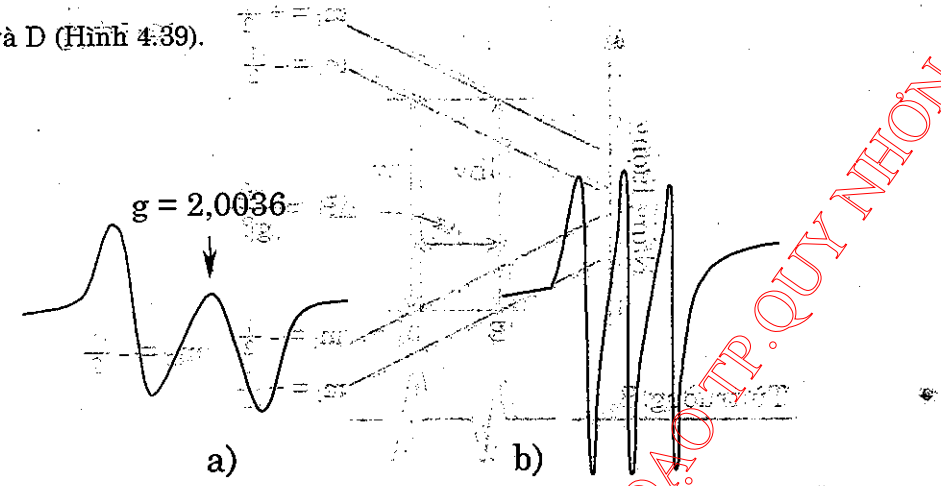
Hình 4.38. Sơ đồ phân tách cường độ từ trường khi có tương tác spin electron với spin hạt nhân có I = 1 (^{14}N) và cấu trúc siêu tinh tế của phổ ESR.

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 10000 TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú

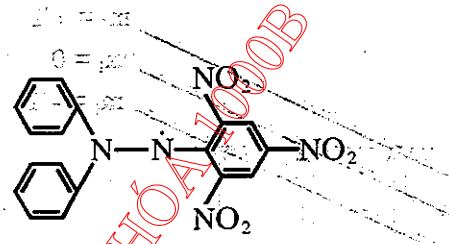
WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Ví dụ minh họa cho hai trường hợp trên là phổ ESR của gốc OH là một duplet (^1H có $I = \frac{1}{2}$) còn của gốc OD là một triplet (D có I = 1) do sự tương tác của electron độc thân với hạt nhân ^1H và D (Hình 4.39).



Hình 4.39. Phổ kích thích tia γ ở 70°K a) ỌH b) ỌD

Trường hợp một electron độc thân tương tác với nhiều hạt nhân từ cùng loại thì cấu trúc tinh tế của phổ ESR gồm (2nI + 1) đỉnh, trong đó n là số hạt nhân từ và I là số lượng tử spin của hạt nhân từ.



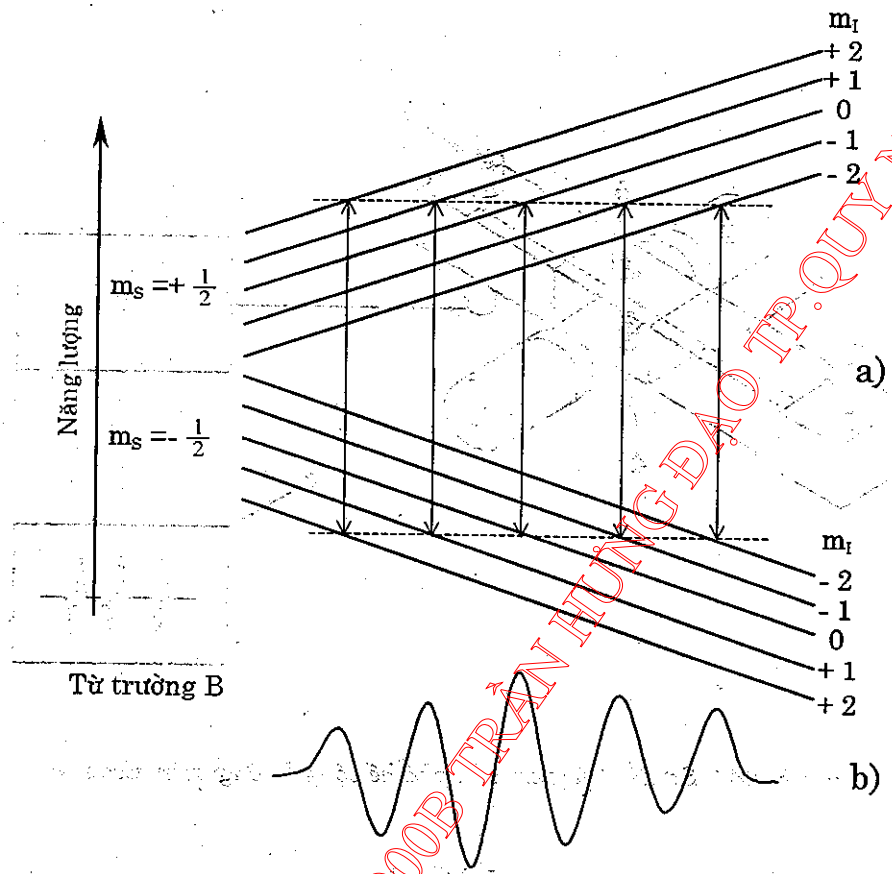
DPPH

Ví dụ gốc 1,1-diphenyl-2-picrylhidrazin (DPPH) có một electron độc thân tương tác với hai hạt nhân ^{14}N (I = 1) nên cấu trúc phổ siêu tinh tế ESR của nó gồm có 2 x 2 x 1 + 1 = 5 đỉnh như phổ thực nghiệm chỉ ra ở DPPH hình 4.40. Tỉ lệ chiều cao của các đỉnh là 1 : 2 : 3 : 2 : 1 và yếu tố g = 2,0036.

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM



Hình 4.40. Sơ đồ phân tách các mức cường độ từ trường B (a) và cấu trúc phổ siêu tinh tế của DPPH (b)

4.11.3. Kĩ thuật thực nghiệm

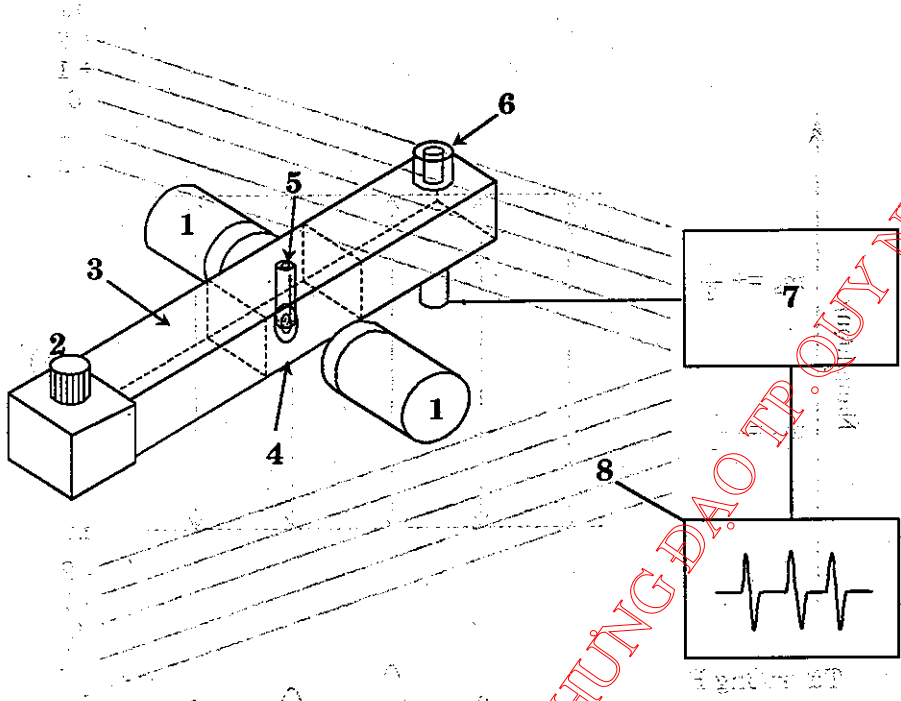
Phổ kế cộng hưởng spin electron loại đơn giản như sơ đồ dưới đây (hình 4.41) gồm các bộ phận sau:

1. Nam châm tạo ra từ trường Bo
2. Klistron phát ra bức xạ vi sóng
3. Ống dẫn vi sóng hình trụ vuông có hộp cộng hưởng đựng mẫu đo.
4. Đetectơ tinh thể
5. Bộ khuyếch đại và ghi tín hiệu.

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM



Hình 4.41. Sơ đồ đơn giản của phổ kế cộng hưởng spin electron

1. Nam châm
2. Klistron
3. Ống dẫn vi sóng
4. Hộp cộng hưởng
5. Mẫu đo
6. Đêtectơ tinh thể
7. Khuyếch đại
8. Tự ghi phổ.

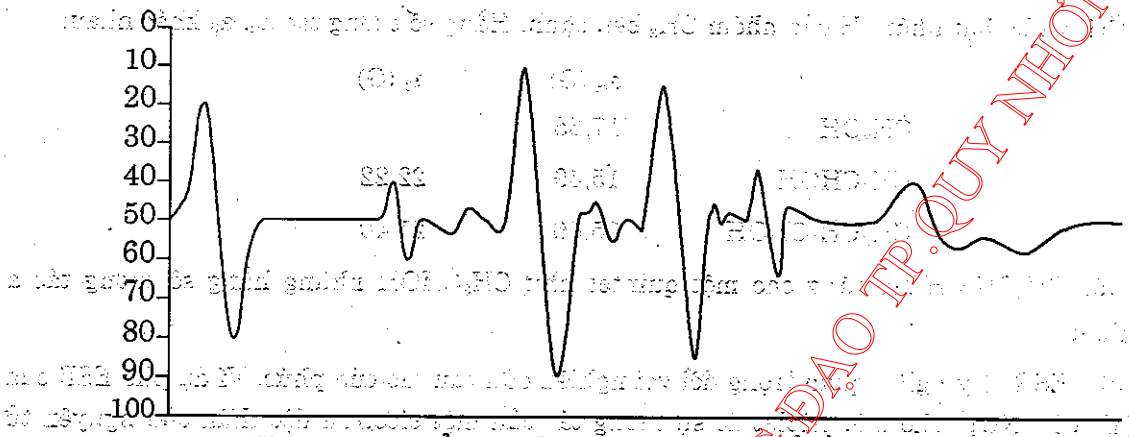
Nam châm đòi hỏi có độ ổn định và đồng nhất cao, thực tế thường dùng loại có cường độ từ trường 13 kG, khi đó tần số cộng hưởng của electron là 36 GHz (tương ứng với chiều dài sóng λ = 8mm nằm trong vùng vi sóng). Ống Klistron phát bức xạ vi sóng đi qua ống dẫn vi sóng đến hộp cộng hưởng kích thích mẫu. Tín hiệu cộng hưởng sinh ra được dẫn đến bộ đêtectơ tinh thể để thu lại, rồi khuyếch đại đưa sang bộ xử lí vi tính và ghi kết quả. Do tín hiệu cộng hưởng trong phổ ESR có khả năng phân tách cao, từ 1 đến 20 G (trong phổ ^{1}H-NMR khả năng phân tách tín hiệu cộng hưởng chỉ khoảng 1 mG hoặc nhỏ hơn) do đó đòi hỏi khoảng quét từ trường rất lớn. Chẳng hạn với phổ kế ESR có tần số 9,5 GHz đòi hỏi quét từ trường một khoảng từ 50 đến 5500 G. Chính vì lẽ đó ở phổ kế NMR người ta sử dụng phương pháp quét tần còn trong phổ kế ESR phải dùng phương pháp quét trường như phương trình (4.22) và (4.23) đã dẫn ra.

DIỄN ĐÀN TOÁN LÍ - HÓA 100 BÙI TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Do tín hiệu có cường độ yếu nên phổ ESR được ghi theo phương pháp dẫn xuất như chỉ ra ở hình 4.42.



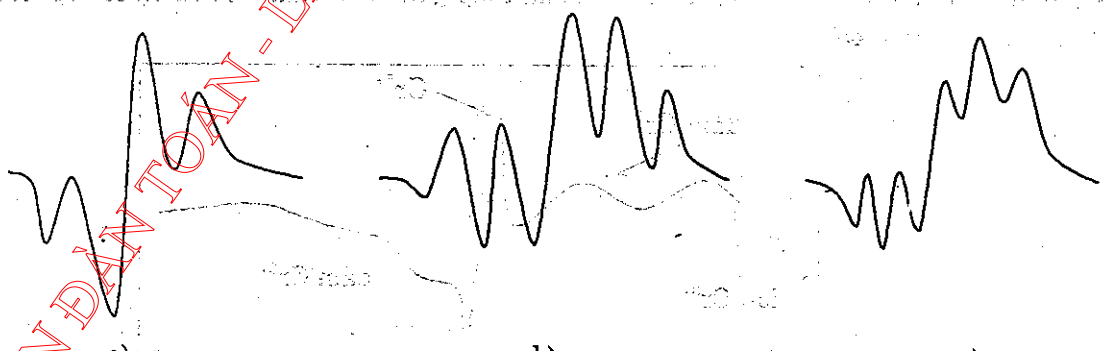
Hình 4.42. Phổ ESR của CH_3OD kích thích bằng tia tử ngoại.

4.11.4. Ứng dụng

Phổ ESR được sử dụng để nghiên cứu các hệ chứa electron độc thân như các gốc tự do, các hợp chất mà liên kết của nó dễ dàng bị bẻ gãy qua chiếu xạ hay điện li để tạo ra các gốc tự do, các nguyên tử hay phân tử có chứa electron độc thân như nguyên tử hidro, nitơ, phân tử NO, các phân tử có tính thuận từ như O_2, các nguyên tử của nguyên tố chuyển tiếp có vỏ electron chưa đầy, các kim loại và bán dẫn có tính thuận từ do có các electron dẫn điện.

Phổ ESR còn được sử dụng để nghiên cứu các gốc xuất hiện trong quá trình phản ứng, từ đó có thể giải thích được cơ chế phản ứng và tìm ra các điều kiện tối ưu cho phản ứng. Điều này có ý nghĩa rất lớn khi nghiên cứu phản ứng polime hóa.

Ví dụ khi chiếu tia γ vào phân tử metanol CH_3OH và ghi phổ ESR ở 77°K nhận được một triplet (*hình 4.43a*) do sự hình thành gốc CH_2OH, còn khi chiếu tia γ vào phân tử etanol CH_3CH_2OH và cũng ghi phổ ESR ở 77°K nhận được một quintet (*hình 4.43b*) do hình thành gốc CH_3CHOH



Hình 4.43. Phổ ESR ở 77°K khi kích thích bằng tia γ của

a) CH_3OH b) CH_3CH_2OH c) $CH_3CH_2CH_2OH$

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 100% TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

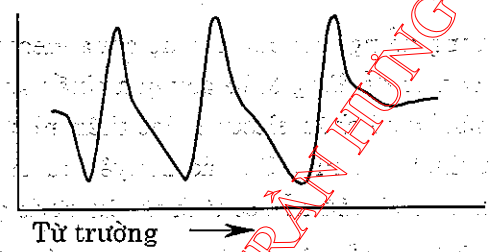
WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Sở dĩ gốc $\dot{C}H_2OH$ cho một triplet vì có sự tương tác của electron độc thân với hai hạt nhân ^1H nằm trên cacbon $\dot{C}H_2$ - theo quy tắc số vạch tối đa bằng $2I + 1 = 2\times\frac{1}{2} + 1 = 3$. Trong khi đó gốc $CH_3\dot{C}H_2OH$ cho một quintet vì electron tự do đã tương tác với hai hạt nhân ^1H của nhóm $\dot{C}H_2$ và ba hạt nhân ^1H của nhóm CH_3 bên cạnh. Hằng số tương tác a_α, a_β khác nhau:

	a_α (G)	a_β (G)
$\dot{C}H_2OH$	17,38	
$CH_3\dot{C}HOH$	15,40	22,22
$CH_3CH_2\dot{C}HOH$	15,06	21,40

Gốc $CH_3CH_2\dot{C}HOH$ cũng cho một quintet như $CH_3\dot{C}HOH$ nhưng hằng số tương tác a khác nhau.

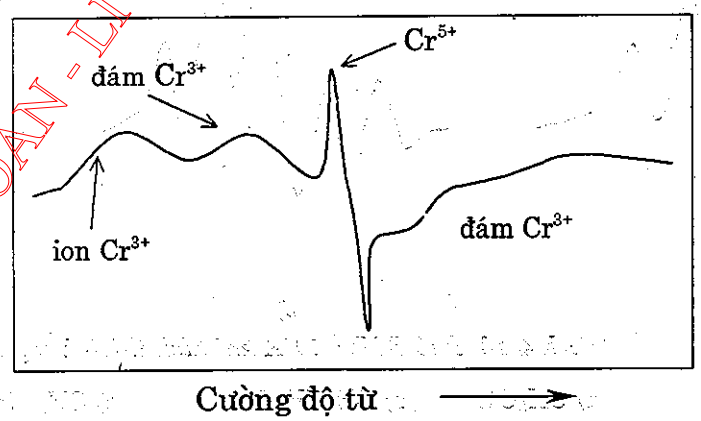
Phổ ESR có ý nghĩa quan trọng đối với nghiên cứu cấu tạo của phức. Ví dụ phổ ESR của phức $[Fe(CN)_5NO]^{3-}$ cho một triplet do sự tương tác của một electron độc thân của nguyên tử Fe với hạt nhân ^{14}N của NO có I = 1 (*hình 4.44*)



***Hình 4.44.** Phổ ESR của ion phức $[Fe(CN)_5NO]^{3-}$*

Phổ ESR cũng được dùng trong nghiên cứu cấu tạo xúc tác, ví dụ phổ ESR của xúc tác crôm - nhôm ghi ở trường từ 0 đến 6000 Gaus chỉ ra ở hình 4.45 cho ta thấy sự phân biệt các trạng thái hóa trị khác nhau.

Một đám rộng ở g = 2 chỉ ra sự có mặt của một nhóm ion Cr^{3+}, còn một đỉnh nhọn chứng tỏ sự có mặt của ion Cr^{5+} riêng rẽ, đỉnh ở trường thấp gần 1600 Gaus chỉ ra sự có mặt của ion Cr^{3+} tách biệt (*hình 4.45*).



***Hình 4.45.** Phổ ESR của xúc tác crôm - nhôm*

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON
DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP.QUY NHƠN

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Ngoài ra phổ ESR cũng được sử dụng để xác định trạng thái oxy hóa của kim loại, xác định các ion kim loại và nghiên cứu các quá trình sinh học.

4.11.5. Bài tập áp dụng:

1/. Tính tần số cộng hưởng của electron độc thân trong từ trường 3000 G (0,3 T)

Giải: Từ phương trình (4.15) ta có:

$$\Delta E = h\nu = g\beta B_o$$

Ở đây: $g = 2$, $b = 9{,}274 \times 10^{-24}\ JT^{-1}$

$B_o = 0{,}3$ T và $h = 6{,}627 \times 10^{-34}$ J.s

$$\nu = \frac{g\beta B_o}{h} = \frac{2 \times 9{,}274 \times 10^{-34}\ JT^{-1} \times 0{,}3T}{6.627 \times 10^{-24}\ J.s}$$

$$= 8{,}397 \times 10^9\ Hz = 8397\ MHz = 8{,}397\ GHz$$

2/. Tính cường độ từ trường nam châm của phổ kế cộng hưởng spin electron (ESR) có tần số cộng hưởng là 35.000 MHz.

Giải: Từ phương trình (4.15) ta có:

$$B_o = \frac{h\nu}{g\beta}$$

Ở đây: $g = 2$, $\beta = 9{,}274 \times 10^{-24}$ Js

$h = 6{,}627 \times 10^{-34}$ Js , $\nu = 35000$ MHz

$= 35 \times 10^9$ Hz

Thay vào có:

$$B_o = \frac{6{,}627 \times 10^{-34}\ Js \times 35 \times 10^9}{2 \times 9.274 \times 10^{-24}\ JT^{-1}}$$

$$B_o = 1{,}250\ T$$

3/. Tính giá trị g của một gốc metyl $\dot{C}H_3$ biết tần số cộng hưởng của nó là 9230 MHz khi đo trong phổ kế ESR có cường độ từ trường B_o là 3290 G (0,3290 T).

Giải: Từ phương trình (4.15) có:

$$g = \frac{h\nu}{\beta B_o}$$

$$g = \frac{6{,}627 \times 10^{-34}\ Js \times 9.230 \times 10^9\ s^{-1}}{9.274 \times 10^{-24}\ JT^{-1}\ x}$$

$$g = 2{,}004729$$

4/. Phổ ESR của nguyên tử H đo bằng phổ kế ESR có tần số 9300 MHz, nhận được hai đỉnh ở 3570 G và 3044 G. Tính hằng số tương tác siêu tinh tế của nguyên tử H.

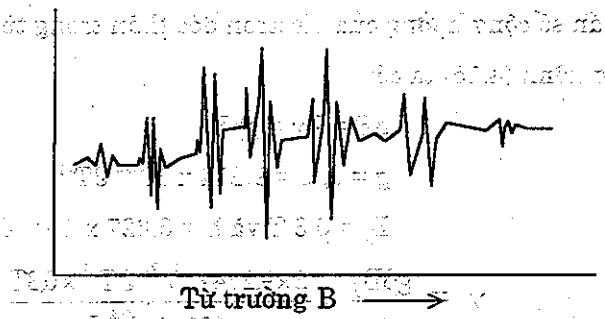
Giải: Hằng số siêu tinh tế của nguyên tử H bằng:

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

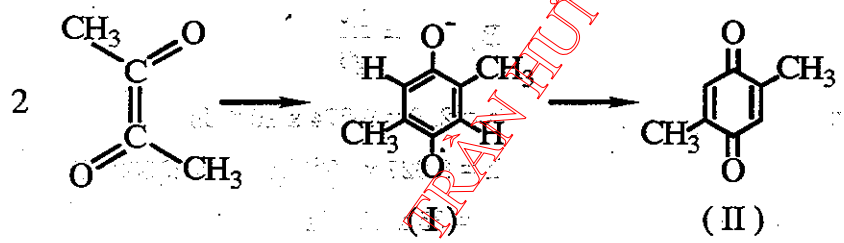
5/. Phổ ESR của sản phẩm phản ứng ngưng tụ điaxetylbenzoquinon trong sự có mặt của bazơ chỉ ra ở hình 4.46. Hãy giải thích sự liên quan giữa cấu tạo chất và cấu trúc phổ.



Hình 4.46

Giải:

Phổ ESR chỉ xuất hiện khi phân tử có mặt electron độc thân cho nên trong phản ứng phải tồn tại một dạng gốc như là một sản phẩm trung gian theo sơ đồ sau:



(I) (II)

Phổ ESR là của gốc (I), gốc này có electron độc thân nằm trên một nguyên tử oxi tương tác với 6 H của hai nhóm CH_3 và 2 H của vòng benzen. Theo qui tắc vạch bội bằng (2nI + 1) thì electron độc thân tương tác với 6 H cho 7 đỉnh, nhưng mỗi đỉnh lại tương tác với 2 H của vòng benzen trở thành nhóm triplet (3 đỉnh), như vậy cấu trúc phổ ESR siêu tinh tế của nó gồm 7 nhóm đỉnh triplet. Phổ ESR thực nghiệm dẫn ra ở trên cũng gồm 7 nhóm đỉnh, nhưng các nhóm ở ngoài chỉ rõ hai đỉnh, do cường độ yếu đã không ghi được đỉnh thứ ba.

6/. Chất nào dưới đây cho tín hiệu trên phổ ESR

a) H b) H_2 c) Na^+ d) Cl e) $\dot{C}H_3$

f) NO_2 g) CO_2 h) Fe^{2+} i) Fe^{3+} k) Cu^{2+}

Giải:

a) Nguyên tử H có một electron độc thân ($1s^1$) do đó có phổ ESR.

b) Phân tử H_2 không có electron độc thân $(1s\ \sigma g)^2$ do đó không có phổ ESR.

c) Na+ không có electron độc thân ($1s^2\ 2s^2\ 2p^6$) do đó không có phổ ESR.

d) Nguyên tử Cl có electron độc thân ($1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^5$) do đó có phổ ESR.

e) Gốc $\dot{C}H_3$ có electron độc thân nên có phổ ESR.

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÝ - HÓA 000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

f) Phân tử NO_2 có tổng số 23 electron, trong đó có 17 electron hóa trị, có electron độc thân nên có phổ ESR.

g) Phân tử CO_2 không có electron độc thân nên không có phổ ESR.

h) Ion Fe^{2+} có cấu hình electron 2 8 14, không có electron độc thân nên không có phổ ESR.

i) Ion Fe^{3+} có cấu hình electron 2 8 13, có electron độc thân do đó có phổ ESR.

k) Ion Cu^{2+} có cấu hình electron 2 8 17, có electron độc thân nên có phổ ESR.

7/. Vanađyl axetylaxetonat có phổ ESR gồm 8 đỉnh. Hãy tính spin I của hạt nhân ^{51}V.

Giải:

Ion VO_2^+ có electron độc thân, nó tương tác với spin hạt nhân ^{51}V, số mức tách ra là:

$2I + 1 = 8$ (Do đó có 8 đỉnh phổ)

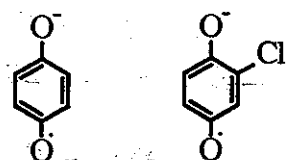
hay $I = \frac{8-1}{2} = \frac{7}{2}$

8/. Phổ ESR của ion phức $[Mo(CN)_8]^{3-}$ gồm một đỉnh. Nếu mẫu được làm giàu ^{13}C thì phổ ESR của nó sẽ gồm 9 đỉnh. Hãy giải thích.

Giải: Nguyên tử ^{12}C có $I = 0$, nên electron độc thân của ion Mo^{5+} (cấu hình electron 2 8 18 9) không có tương tác với ^{12}C. Khi làm giàu ^{13}C ($I = \frac{1}{2}$), xuất hiện nhóm $^{13}C \equiv N$, do đó có tương tác của electron độc thân của Mo^{5+} với 8 hạt nhân ^{13}C nên phân tách các mức năng lượng theo phương trình:

$2 \times nI + 1 = 2 \times 8 \times \frac{1}{2} + 1 = 9$ Kết quả thu được phổ ESR gồm 9 đỉnh.

9/. Cấu trúc phổ siêu tinh tế ESR của anion gốc p-benzosemiquinon (A) và 2-clo-p-benzosemiquinon (B) sẽ như thế nào, giải thích.



(A) (B)

Giải: Cấu trúc tinh tế phổ ESR của anion gốc p-benzosemiquinon gồm $2 \times 4 \times \frac{1}{2} + 1 = 5$ đỉnh; còn của 2-clo-p-benzosemiquinon gồm $2 \times 3 \times \frac{1}{2} + 1 = 4$ đỉnh.

10/. a) Tính tần số cộng hưởng của phổ kế ESR khi cường độ từ trường của nam châm là 13 KG. Giải: 36387 MHz hay 36,387 GHz

b) Tính cường độ từ trường của nam châm cho phổ kế ESR có tần số 40 GHz.

Giải: 14,3 KG hay 1,43 T.

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

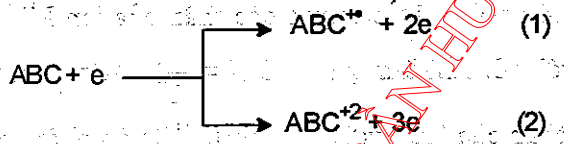
Chương 5

PHỔ KHỐI LƯỢNG

Phổ khối lượng, viết tắt MS (Mass Spectrometry) là phương pháp phân tích được sử dụng rộng rãi hiện nay trong hóa học.

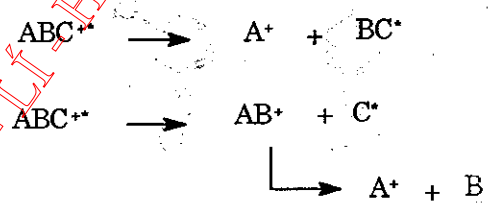
5.1. Nguyên tắc chung

Khi cho các phân tử ở trạng thái khí va chạm với một dòng electron có năng lượng cao thì từ các phân tử sẽ bật ra 1 hay 2 electron, và nó trở thành các ion có điện tích +1 (chiếm tỉ lệ lớn) và +2:



Loại ion (1) được gọi là ion gốc hay ion phân tử.

Nếu các ion phân tử tiếp tục va chạm với dòng electron có năng lượng lớn thì chúng sẽ bị phá vỡ thành nhiều mảnh ion, thành các gốc hoặc các phân tử trung hòa khác nhau, được gọi là quá trình phân mảnh (fragmentation):

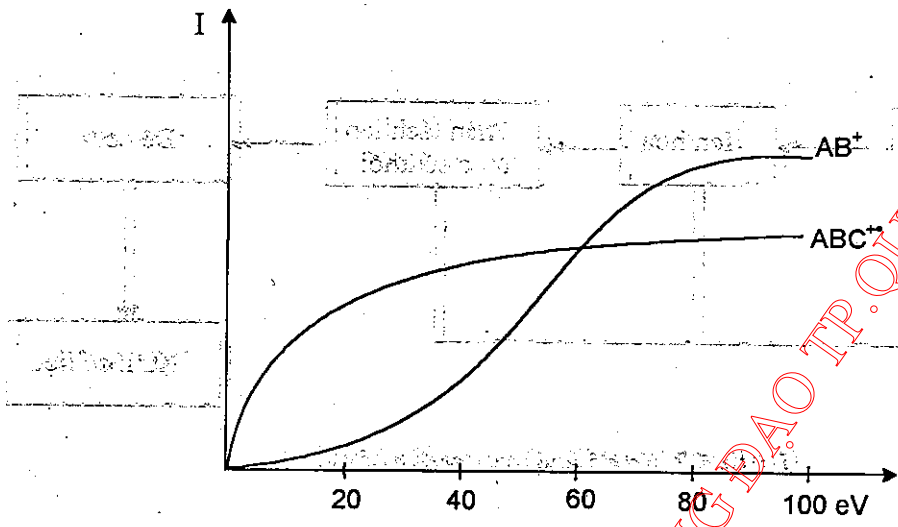


Năng lượng của quá trình phân mảnh chỉ vào khoảng 30-100 eV, cao hơn năng lượng ion hoá phân tử (8-15 eV). Quá trình biến các phân tử trung hòa thành các ion được gọi là sự ion hóa.

Trên đồ thị (*hình 5.1*) chỉ ra xác suất có mặt của các ion phụ thuộc vào năng lượng va chạm ở phân tử. Năng lượng khoảng 15 eV thì ion phân tử đạt cực đại nhưng các mảnh ion tiếp tục tăng đến khi năng lượng đạt khoảng 70 eV thì tăng chậm lại và đạt giá trị cực đại.

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 10000 TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN
https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM



Hình 5.1 Xác suất có mặt ion mảnh ở axeton.

Các ion có khối lượng m và điện tích e. Tỉ số m/e được gọi là số khối z. Bằng cách nào đó tách các ion có số khối khác nhau ra khỏi nhau và xác định được xác suất có mặt của chúng rồi vẽ đồ thị biểu diễn mối liên quan giữa xác suất có mặt (hay cường độ I) và số khối z thì đồ thị này được gọi là phổ khối lượng (*hình 5.8*).

5.2. Kĩ thuật thực nghiệm

Nguyên lí cấu tạo khối phổ kế

Khối phổ kế được chế tạo đầu tiên vào năm 1912 (J.Thompson, Anh) nhưng đến năm 1939 mới được hoàn thiện (F.W.Aston). Sơ đồ nguyên lí cấu tạo chung của phổ kế gồm các bộ phận sau *(hình 5.2)*:

- Hoá khí mẫu
- Ion hoá
- Phân tách các ion
- Thu gom các ion theo số khối
- Xử lí số liệu

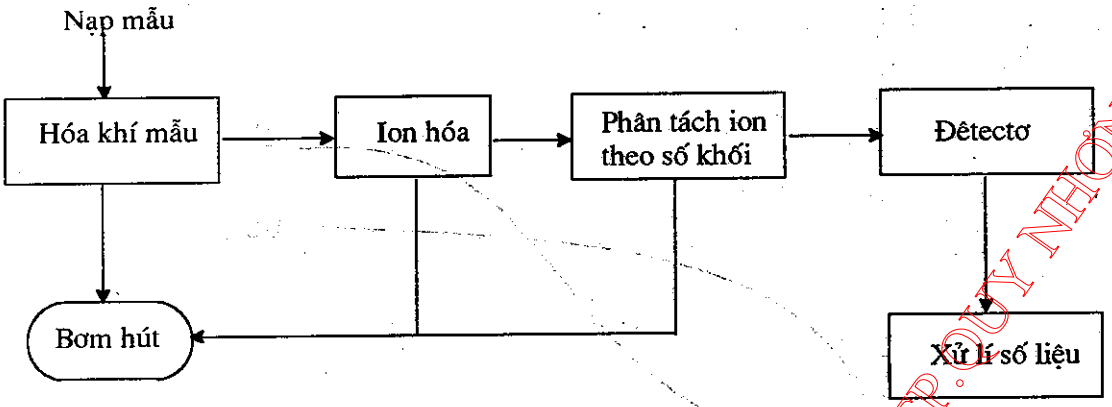
5.2.1. Hoá khí mẫu

Các mẫu được nạp vào phổ kế có thể ở dạng khí, lỏng hay rắn. Trước tiên mẫu được nạp vào một buồng kín dưới áp suất thấp từ 10^{-5} đến 10^{-7} mmHg và nhiệt độ đốt nóng có thể đến 200°C. Dưới điều kiện này thì hầu hết các chất lỏng và rắn đều biến thành thể hơi.

DIỄN ĐÀN TOÁN-LÍ-HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM



Hình 5.2 Sơ đồ khối của khối phổ kế.

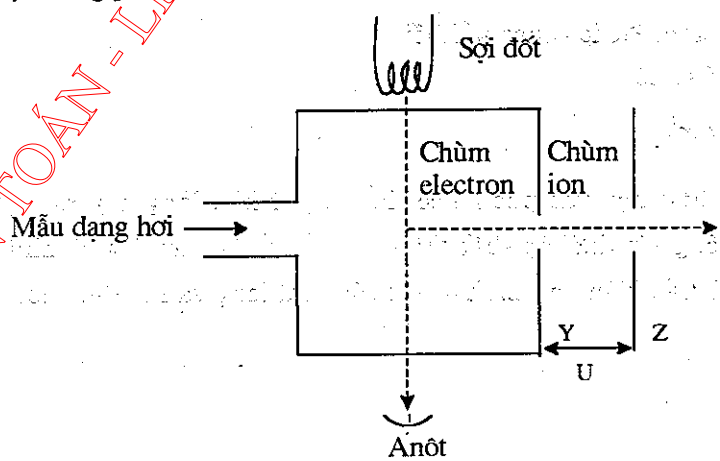
5.2.2. Ion hoá mẫu

Mẫu sau khi đã hoá hơi được dẫn vào buồng ion hoá để biến các phân tử trung hòa thành các ion. Quá trình ion hoá này có thể thực hiện theo một số phương pháp khác nhau như:

- Phương pháp va chạm electron
- Phương pháp ion hoá hoá học
- Phương pháp ion hoá trường
- Phương pháp ion hoá photon
- Phương pháp bắn phá ion

a) Phương pháp va chạm electron

Mẫu chất ở dạng hơi được dẫn vào một buồng, ở đây có một dòng electron mang năng lượng cao chuyển động vuông góc với mẫu và xảy ra va chạm giữa chúng, biến các phân tử trung hòa thành các ion phân tử hoặc các ion mảnh. Năng lượng của dòng electron vào khoảng 10 eV đến 100 eV. Sau đó dòng ion mới được tạo ra, chạy qua một điện trường E để làm tăng tốc độ chuyển động, thế của điện trường được gọi là thế tăng tốc U *(xem hình 5.3)*. Phương pháp này được dùng phổ biến.



Hình 5.3 Sơ đồ buồng ion hoá theo phương pháp va chạm electron.

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 9000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

b) Phương pháp ion hoá hoá học

Ion hoá hoá học là cho dòng phân tử khí va chạm với một dòng ion dương hoặc ion âm để biến các phân tử trung hòa thành ion phân tử hay ion mảnh. Trong quá trình này, trước tiên phải biến các phân tử khí metan thành ion, sau đó các ion này mới va chạm với các phân tử mẫu theo các bước sau:

Bước 1:

$$CH_4 \xrightarrow{-e} CH_4^{\dot{+}} \ (CH_3^+)$$

$$CH_4 + CH_4^{\dot{+}} \longrightarrow CH_5^+ + CH_3^{\bullet}$$

$$CH_4 + CH_3^+ \longrightarrow C_2H_5^+ + H_2$$

Bước 2:

$$CH_5^+ + MH \longrightarrow CH_4 + MH_2^+ \quad \text{(MH= mẫu chất)}$$

$$CH_3^+ + MH \longrightarrow CH_4 + M^+$$

$$CH_4^+ + MH \longrightarrow CH_4 + MH^+$$

c) Phương pháp ion hoá trường

Cho dòng mẫu dạng hơi đi qua giữa hai điện cực cảm ứng có một điện trường mạnh (10^7-10^8 v/cm), dưới tác dụng của lực tĩnh điện, phân tử trung hòa sẽ biến thành các ion dương.

d) Phương pháp ion hoá photon

Cho dòng phân tử mẫu dạng hơi va đập với dòng photon có năng lượng khoảng 10 eV (bức xạ có chiều dài sóng từ 83-155 nm) sẽ xảy ra quá trình ion hoá. Ngày nay có thể sử dụng bức xạ laze Ruby làm nguồn ion hoá.

e) Phương pháp bắn phá ion

Phương pháp bắn phá ion thường dùng là phương pháp bắn phá nguyên tử nhanh.

Một dòng khí agon hay xenon được bắn ra từ một khẩu súng đập thẳng vào mẫu hoà tan trong dung môi như glixerin. Trước tiên, các phân tử dung môi bị ion hoá rồi chính nó ion hoá phân tử mẫu thành các ion tiếp theo.

5.2.3. Tách các ion theo số khối

Các ion hình thành có số khối m/e được phân tách ra khỏi nhau bằng các thiết bị khác nhau như:

- Thiết bị phân tách ion hội tụ đơn
- Thiết bị phân tách ion hội tụ kép
- Thiết bị phân tách ion tứ cực

a) Thiết bị phân tách ion hội tụ đơn

Thiết bị này sử dụng một từ trường đồng nhất của một nam châm hình quạt, có từ trường B *(xem hình 5.4)*. Động năng của một ion có khối lượng m và điện tích e tăng tốc với

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP.QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org

Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú

WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

thế U được biểu diễn theo phương trình:

$$eU = \frac{1}{2}mv^2$$

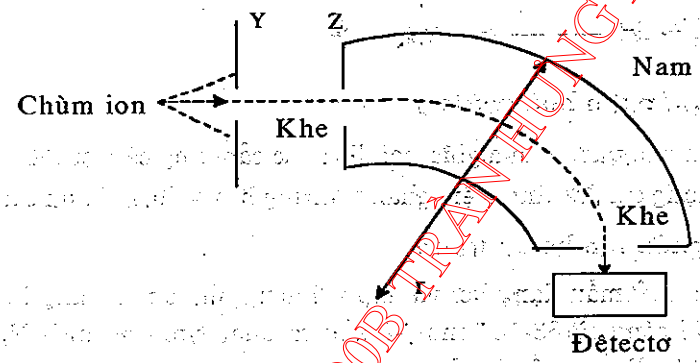
ở đây v là tốc độ chuyển động của ion. Khi nó chuyển động trong từ trường B thì lực tác dụng ở góc phải đối với hướng chuyển động buộc nó chuyển động theo một đường tròn bán kính r theo biểu thức:

$$Bev = \frac{mv^2}{r}$$

thay v ở phương trình trên ta tìm được:

$$\frac{m}{e} = \frac{B^2r^2}{2U}$$

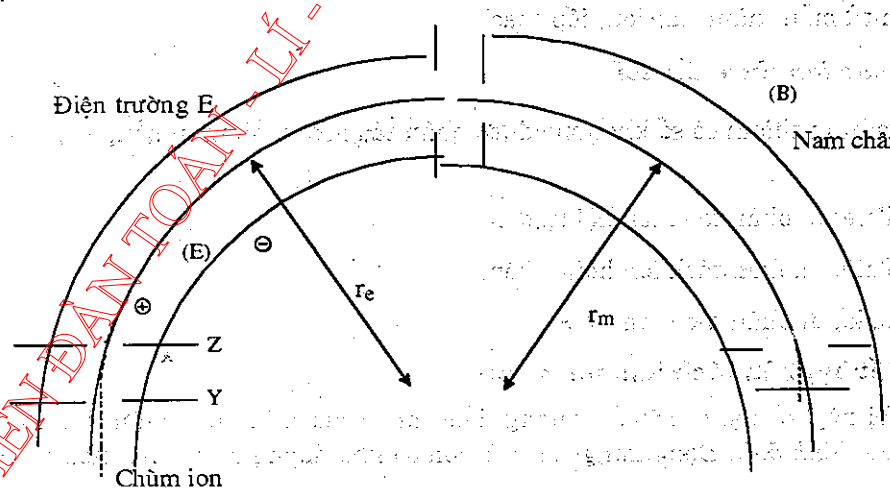
Khi B và U cố định thì số khối m/e chỉ tỉ lệ với r^2, do đó các ion có thể tách ra khỏi nhau. Với thiết bị này, khả năng phân giải của máy có thể đạt đến 5000.



Hình 5.4 *Sơ đồ thiết bị phân tách ion hội tụ đơn.*

b) Thiết bị phân tách ion hội tụ kép

Thiết bị này bao gồm một điện trường E và một từ trường B đặt nối tiếp nhau *(xem hình 5.5)*.



Hình 5.5 *Sơ đồ thiết bị phân tách ion hội tụ kép*

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN
https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Một ion đi qua điện trường chịu một lực tác dụng eE vuông góc với hướng chuyển động. Kết quả là ion chuyển động theo một quĩ đạo tròn mà bán kính của nó được xác định qua biểu thức:

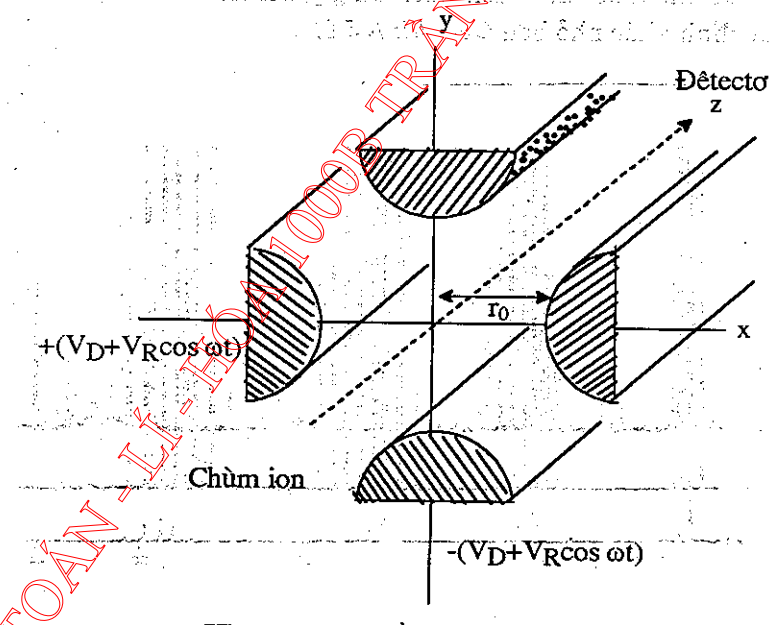
$$eE = \frac{mv^2}{r_e} \qquad \text{hay} \qquad r_e = \frac{m}{e} \cdot \frac{v^2}{E}$$

trong đó v là tốc độ chuyển động, e là điện tích ion, r_e là bán kính quĩ đạo. Từ phương trình trên suy ra: $r_e = \frac{2U}{E}$

Như vậy, qua sự điều chỉnh bán kính r_e mà lựa chọn các ion có động năng nhất định đi đến nam châm và bị phân tách một lần nữa dưới tác dụng của từ trường. Độ phân giải của máy đạt 50.000 đến 100.000.

c) Thiết bị phân tách ion tứ cực

Thiết bị này không dựa trên nguyên lí dùng từ trường mà được sử dụng đồng thời điện áp một chiều V_D và điện áp xoay chiều cao tần V_R đặt vào bốn thanh tròn gọi là bốn cực, cứ hai cực đối diện được nối với nhau và trở thành cực âm hoặc cực dương *(xem hình 5.6)*.



Hình 5.6 *Sơ đồ thiết bị tứ cực.*

Các ion chuyển động theo hướng trục z và dao động về hai hướng (x và y) vuông góc với hướng đi. Đa số các ion sẽ va đập vào các cực khi dao động, chỉ một số ion thỏa mãn phương trình sau mới có thể đi qua đến đêtectơ: $m = \frac{0{,}136U}{r_0^2 f^2}$

ở đây m là khối lượng ion, U là thế tăng tốc, r_0 là một nửa khoảng cách giữa hai cực đối diện, f là tần số dao động của điện áp xoay chiều cao tần. Khi tần số f không đổi, thiết bị như một lưới lọc khối lượng, khi thay đổi tần số dẫn đến quét khối lượng cho phổ khối lượng.

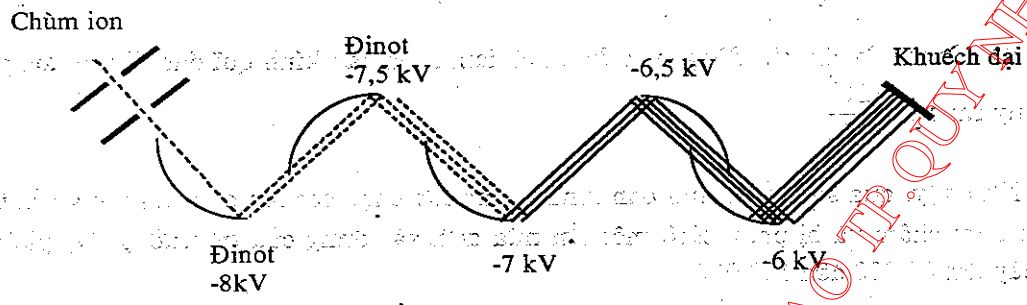
Thiết bị này rẻ và ổn định vì không có từ trường, quét phổ nhanh nhưng có độ phân giải thấp, khoảng từ 1 đến 1500.

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

5.2.4. Đêtectơ

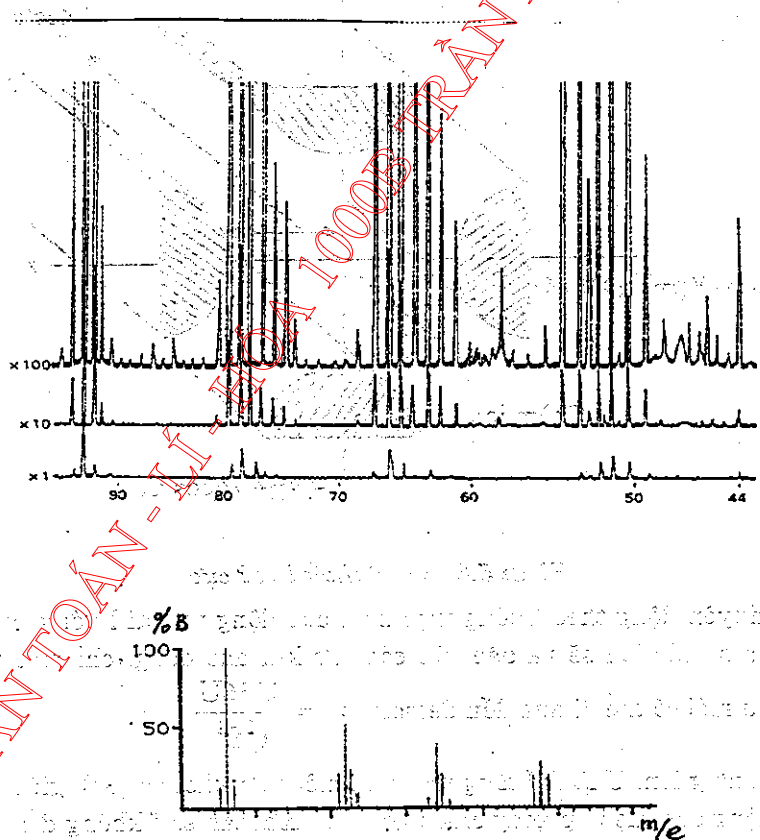
Các ion đi ra từ bộ phân tách có cường độ nhỏ (cỡ nanoampe) nên cần khuếch đại để phát hiện. Một trong những thiết bị này là máy nhân electron. Nó tạo ra các electron thứ cấp khi có ion ban đầu đập vào bề mặt tấm kim loại. Độ khuếch đại khoảng 10^6 khi sử dụng 16 đinôt *(hình 5.7)*.



***Hình 5.7** Sơ đồ hoạt động của máy nhân electron.*

5.2.5. Ghi nhận tín hiệu

Các tín hiệu từ bộ khuếch đại truyền ra được nạp vào bộ nhớ máy tính và xử lí kết quả rồi in ra phổ. Các phổ được biểu diễn dưới dạng phần trăm basic (%B), đỉnh cao nhất có cường độ 100%, các đỉnh khác nhỏ hơn *(xem hình 5.8)*.



***Hình 5.8** Phổ khối lượng.*

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000% TRẦN HƯNG ĐẠO TP QUY NHƠN
https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

5.2.6. Sơ đồ cấu tạo khối phổ kế

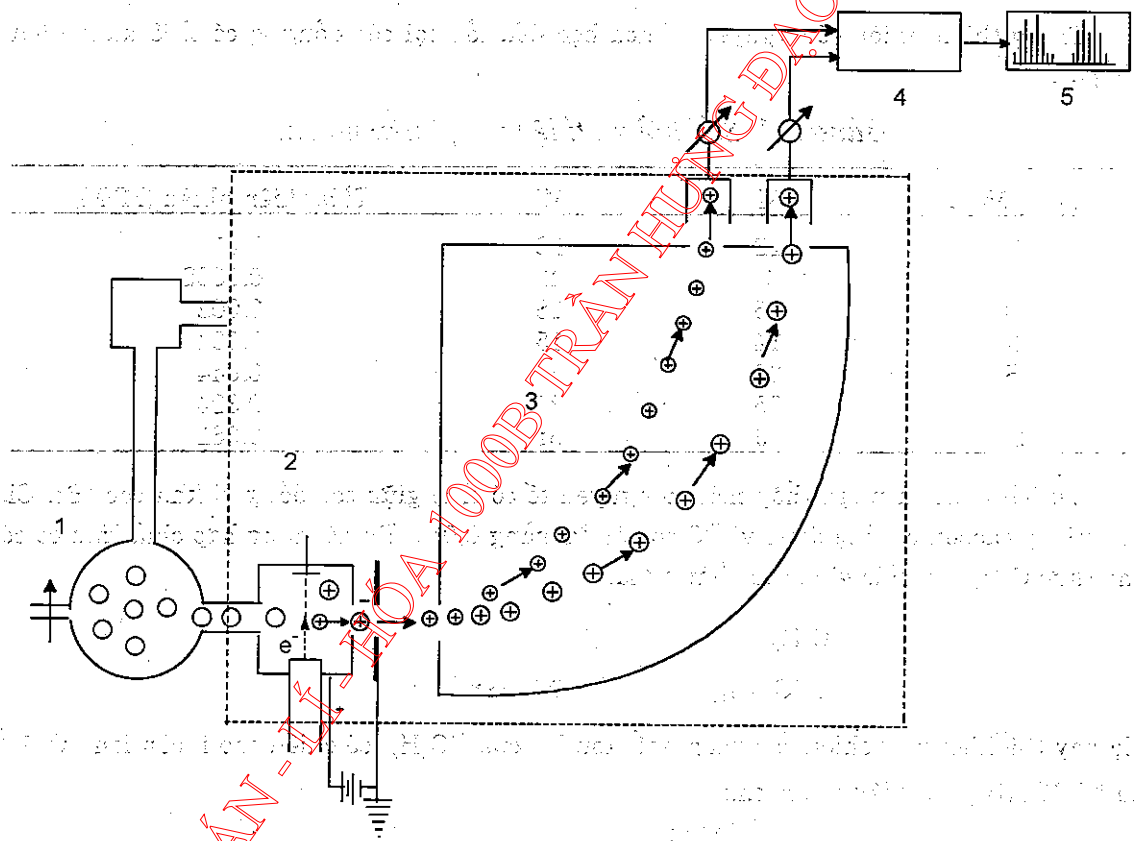
Từ nguyên tắc chung của phương pháp trên, khối phổ kế gồm 4 phần chính:

1- Hoá khí mẫu: các chất rắn hay lỏng được đưa vào buồng mẫu có áp suất giảm 10^{-6} mmHg biến thành dạng khí. Lượng mẫu cần 0,1-1mg.

2- Ion hoá: dẫn dòng phân tử khí chạy qua một dòng electron có hướng vuông góc với nó để ion hoá, rồi đi qua điện trường U để tăng tốc.

3- Tách ion theo khối lượng.

4- Nhận biết các ion bằng đêtectơ.



***Hình 5.9** Sơ đồ khối phổ kế: 1- hoá khí mẫu; 2-buồng ion hoá; 3-tách ion theo khối lượng; 4-đêtectơ; 5-ghi phổ.*

Để đánh giá chất lượng một khối phổ kế người ta dùng khái niệm "*độ phân giải*" R:

$$R = \frac{m}{\Delta m}$$

ở đây m là khối lượng ion, Δm là hiệu số khối lượng hai ion có thể tách khỏi nhau. Giá trị R càng lớn thì máy càng tốt.

Các máy có R=10.000 trở lên là có độ phân giải cao dùng cho xác định cấu tạo chất, còn máy có giá trị R thấp (500-1500) chỉ dùng làm đêtectơ cho máy sắc kí. Máy hiện đại có R=150.000.

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org

Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

5.3. Phân loại các ion

5.3.1. Ion phân tử

Ion phân tử là các ion có số khối lớn nhất, và chính là khối lượng phân tử của chất mẫu. Người ta kí hiệu ion phân tử là M^+. Nếu ion phân tử là số chẵn chứng tỏ phân tử không chứa hoặc chứa một số chẵn nguyên tử nitơ; nếu là số lẻ thì chắc chắn phân tử chứa một số lẻ nguyên tử nitơ. Ngoài ra cường độ (I) của ion phân tử tỷ lệ với nồng độ hợp phần trong hỗn hợp nên có thể dựa vào đó để phân tích định lượng chất.

5.3.2. Ion đồng vị

Trong thiên nhiên các nguyên tố hóa học đều tồn tại các đồng vị có tỉ lệ khác nhau *(bảng 5.1)*.

***Bảng 5.1** Số khối và tỉ lệ trong thiên nhiên.*

Nguyên tố	M	M'	Tỉ lệ thiên nhiên (M'/M)
C	12	13	0,011
H	1	2	0,0002
O	16	18	0,002
N	14	15	0,004
S	32	34	0,044
Cl	35	37	0,324
Br	79	81	0,981

Từ bảng 5.1 ta nhận thấy một số nguyên tố có tỉ lệ giữa các đồng vị khá cao (Br, Cl, S...). Riêng cacbon có tỉ lệ đồng vị ^{13}C so với ^{12}C bằng 0,011. Do đó trong hợp chất hữu cơ có công thức C_nH_{2n} thì tỉ lệ giữa các phân tử là:

$^{12}C_nH_{2n}$ 1

$^{13}C^{12}C_{n-1}H_{2n}$ 0,011×n

tỉ lệ này thể hiện ra ở chiều cao vạch phổ. Ion M^+ của $^{12}C_nH_{2n}$ có chiều cao h còn ion $(M+1)^+$ của $^{13}C^{12}C_{n-1}H_{2n}$ có chiều cao h' thì:

$$\frac{h'}{h} = \frac{0,011 \times n}{1} \qquad \text{do đó}$$

$$n = \frac{h'}{0,011 \times h}$$

Như vậy, dựa vào chiều cao vạch phổ M^+ và $(M+1)^+$ có thể tính được số nguyên tử cacbon trong phân tử.

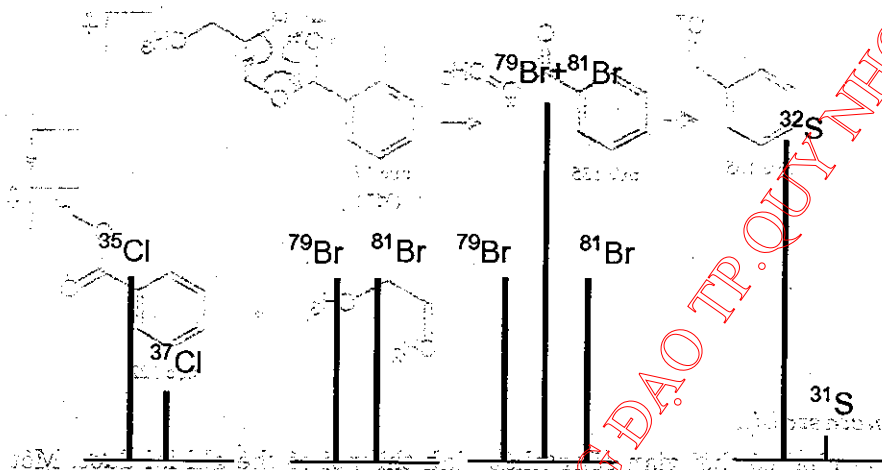
Tương tự như vậy, dựa vào chiều cao vạch phổ M^+ và $(M+2)^+$ để tính số nguyên tử Br, Cl hay S trong các phân tử có chứa các nguyên tố trên.

Hình 5.10 chỉ ra hình dạng chiều cao vạch phổ M^+, $(M+2)^+$ và $(M+4)^+$ của phân tử chứa Br, Cl và S.

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 10006 TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

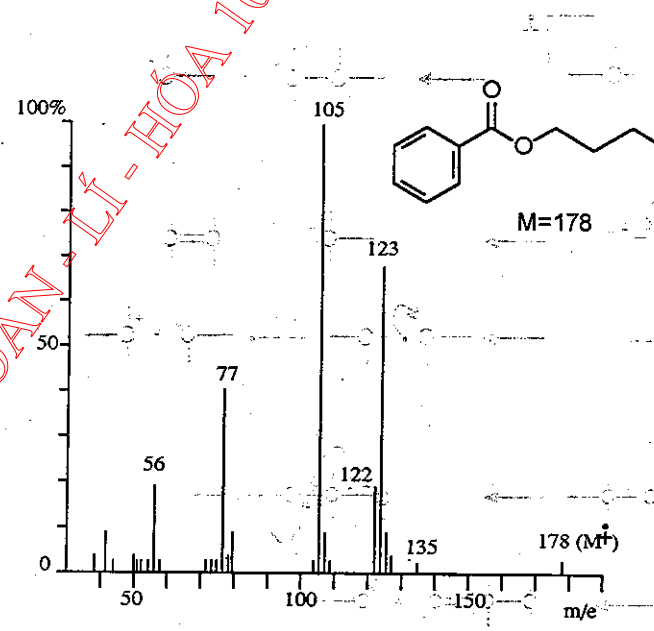
WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM



Hình 5.10 Chiều cao vạch phổ ion phân tử của hợp chất chứa clo, brom hoặc lưu huỳnh.

5.3.3. Ion mảnh

Các ion mảnh là do sự phá vỡ phân tử sinh ra khi va chạm với electron. Tuỳ theo năng lượng va chạm lớn hay nhỏ mà phân tử vỡ thành nhiều mảnh khác nhau, thông thường năng lượng va chạm vào khoảng 70 eV. Ví dụ phổ khối lượng của n-butyl benzoat *(hình 5.11)*.



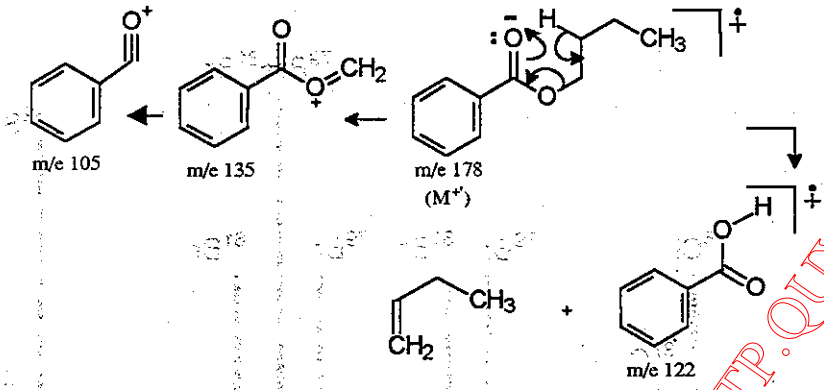
Hình 5.11 Phổ khối lượng của n-butyl benzoat.

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 100% TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Cơ chế phân mảnh:



5.3.4. Ion metastabin

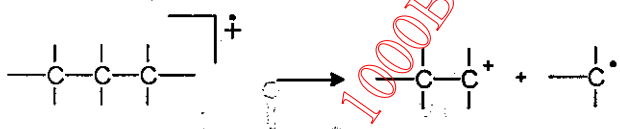
Các ion phải có thời gian sống nhất định thì mới có thể ghi lại được. Một số ion xuất hiện như bước trung gian giữa các ion có khối lượng m_1 và m_2 có thời gian sống ngắn không ghi nhận được đầy đủ cường độ vạch phổ, nhưng cũng có thể phát hiện được sự có mặt của nó, được gọi là ion metastabin m^* mà:

$$m^* = \frac{m_2^2}{m_1}$$

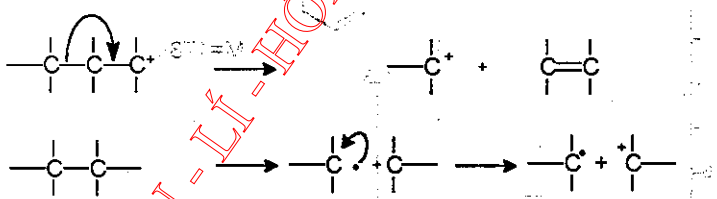
Nhờ m^* ta có thể khẳng định được m_2 là do m_1 sinh ra.

5.4. Cơ chế phân mảnh phân tử

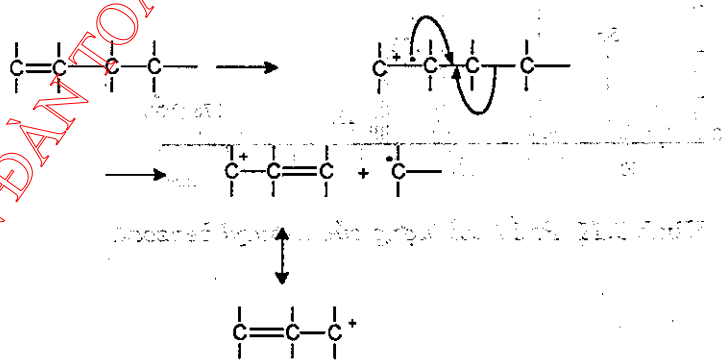
1- Tách ankyl



2- Tách olefin



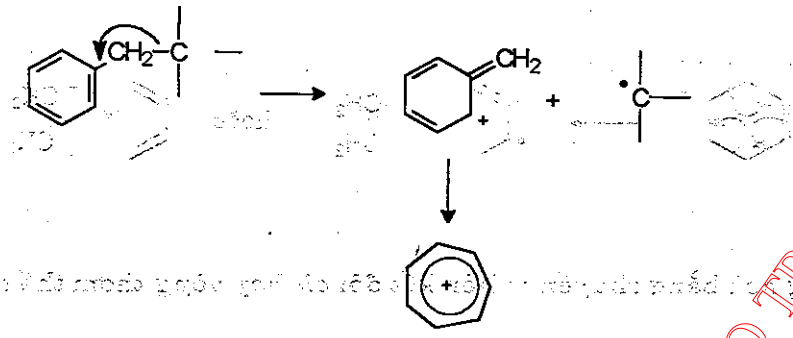
3- Tách allyl



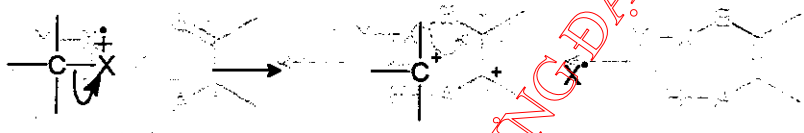
DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

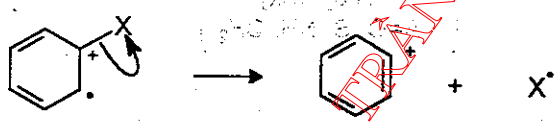
4- Tách ion tropylium (vòng thơm)



5- Tách đồng li

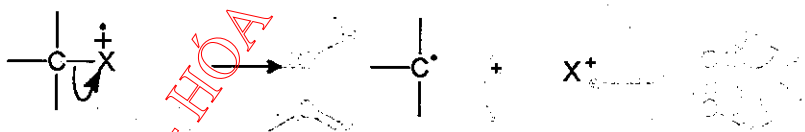


(X=halogen, OH, SH, NH_2, OR)



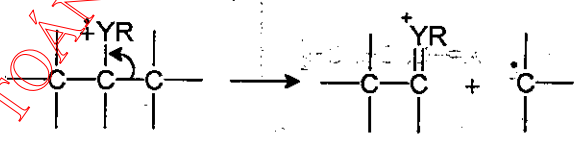
(X=halogen, NO_2)

6- Tách dị li

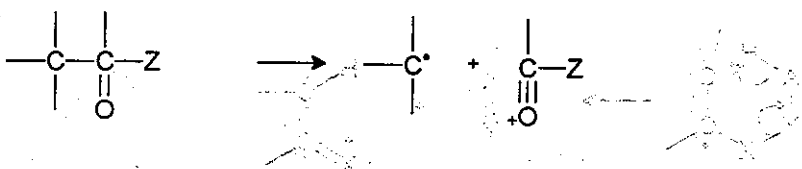


(X=halogen)

7- Tách ở vị trí α đối với nhóm C-Y và C-O



[Y=O, N, S]



[Z=anky!, aryl, H, OR, NH_2]

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 10008 TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

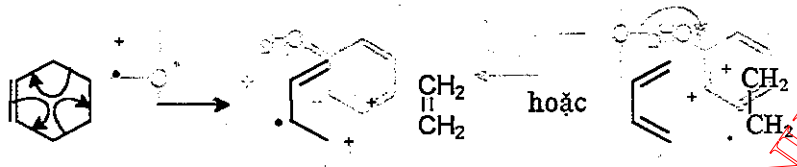
https://tieulun.hopto.org

Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú

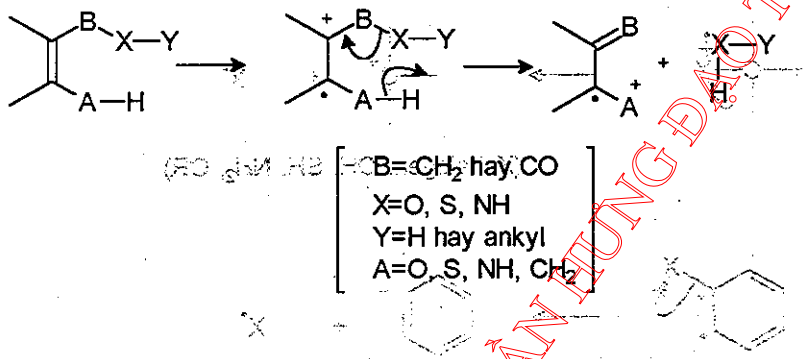
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

8- Tách Retro-Diels-Alder

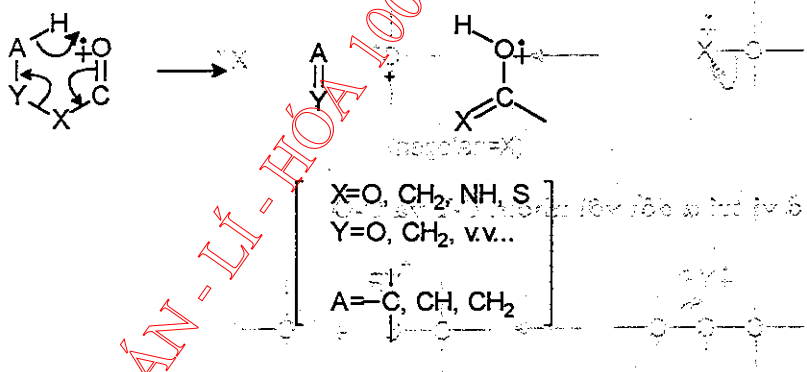


9- Tách phân tử trung hoà bằng chuyển vị liên kết đôi *cis* hay vòng thơm thế *ortho*

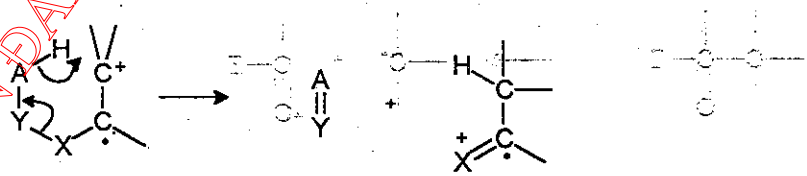


10- Chuyển vị McLafferty

a) Nhóm cacbonyl



b) Vòng thơm và anken

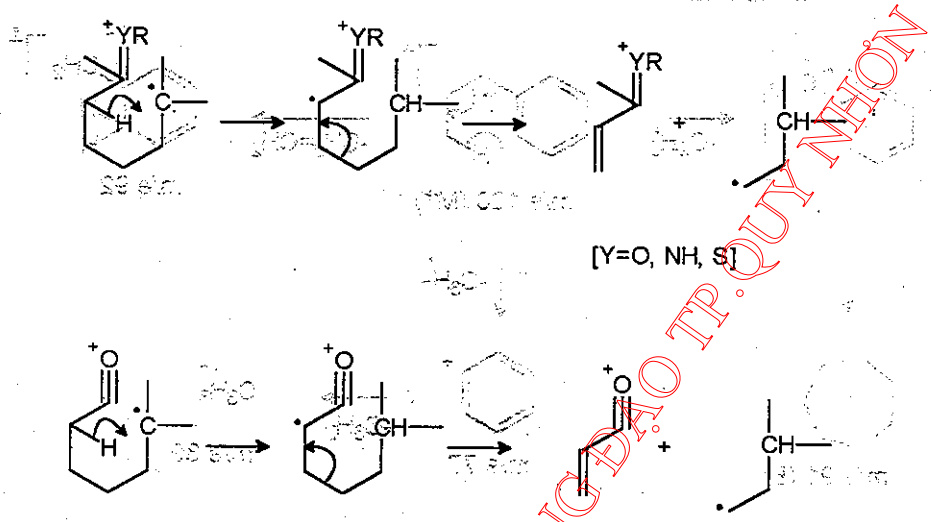


DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

11- Chuyển vị tách gốc



Khi viết cơ chế phân mảnh phân tử cần chú ý:

- Các ion mảnh bao giờ cũng được hình thành từ ion phân tử hoặc ion lớn, không bao giờ từ phân tử trung hòa.

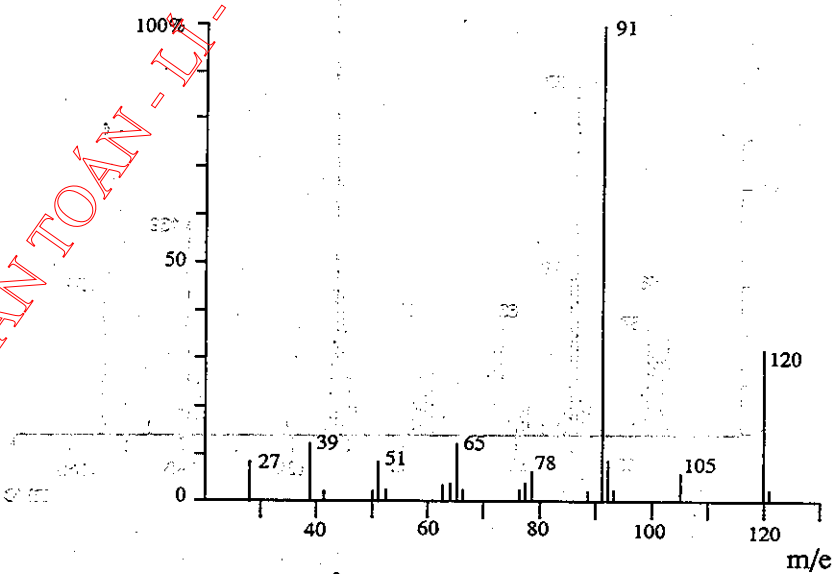
- Bảo đảm cân bằng điện tích giữa hai vế phương trình, ví dụ vế phải có dấu + và gốc (.) thì vế trái cũng phải có dấu + và gốc (.).

- Các ion hình thành luôn tồn tại ở dạng bền (ví dụ $-C\equiv\overset{+}{O}$, $-CH=\overset{+}{O}H$...)

5.5. Phổ khối lượng của một số hợp chất

1-Ankylbenzen

Thường xuất hiện các số khối m/e=39, 50, 51, 65, (76), 77, (78), 91...Ví dụ phổ khối lượng của n-propylbenzen *(hình 5.12)*.



Hình 5.12 Phổ khối lượng của n-propylbenzen.

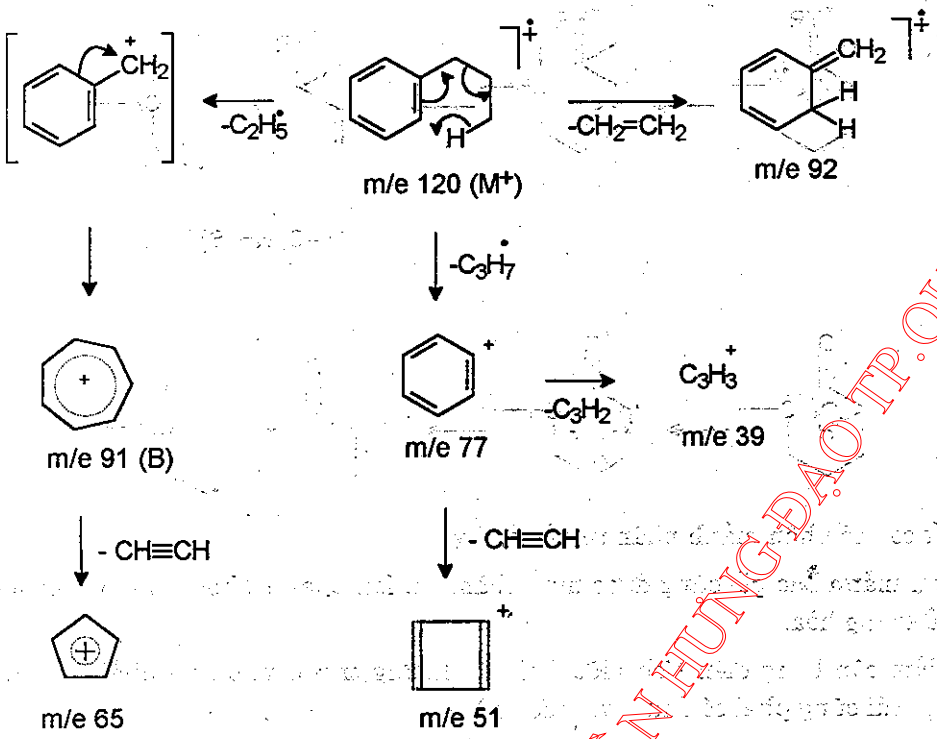
DIỄN ĐÀN TOÁN - LÝ - HÓA 1000 TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org

Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

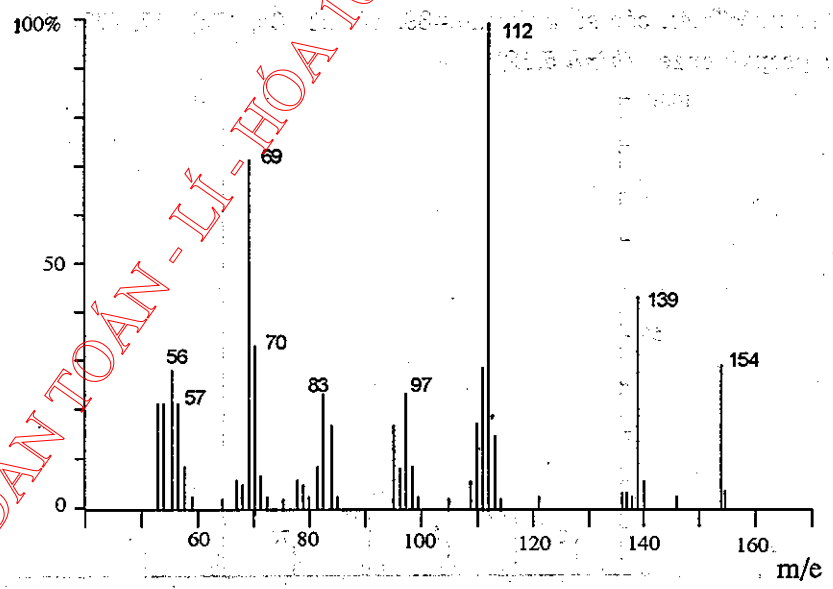
WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Cơ chế phân mảnh:



2- Xeton

Số khối thường gặp là 58, 72, 86. Ví dụ phổ khối lượng của menthon *(hình 5.13)*.

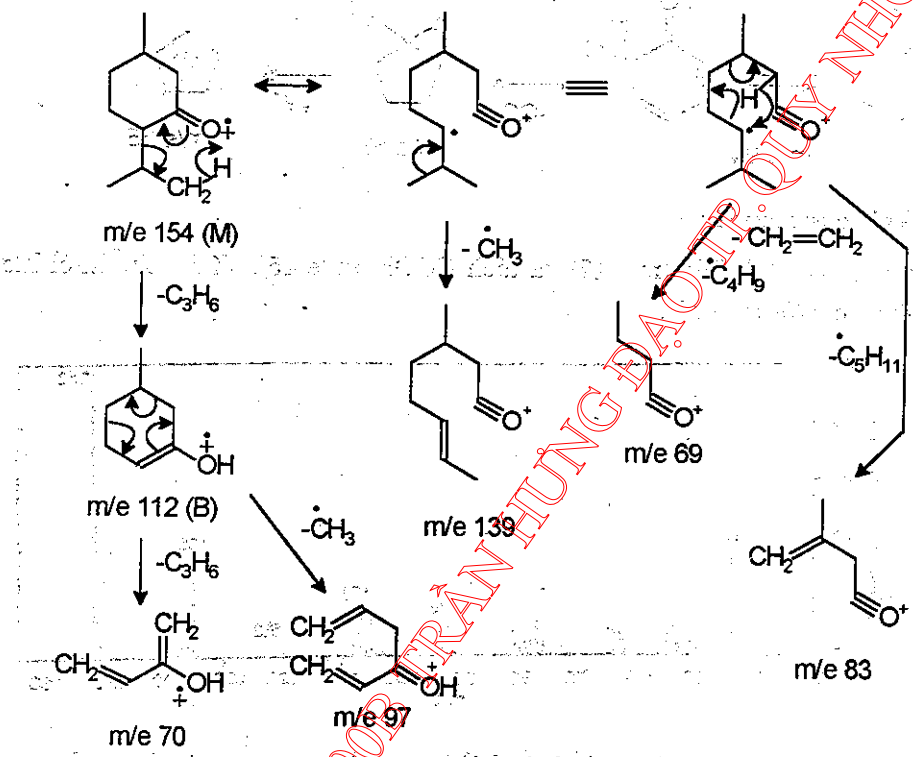


***Hình 5.13** Phổ khối lượng của menthon.*

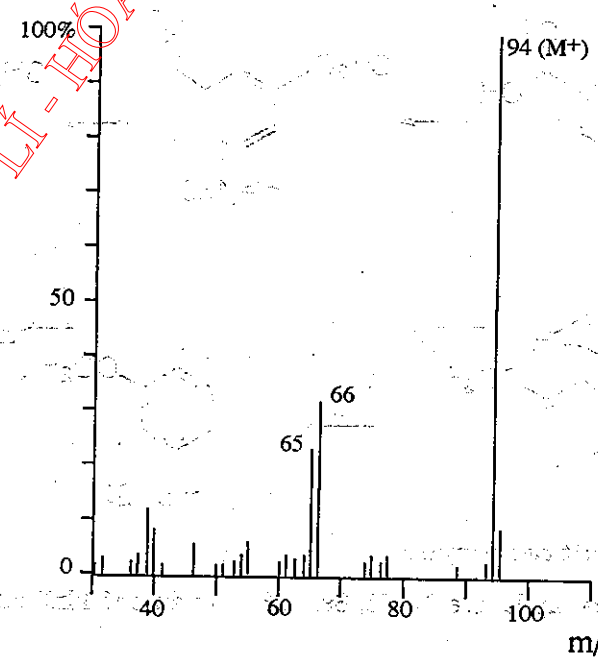
DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN
https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Cơ chế phân mảnh:



3- Phenol



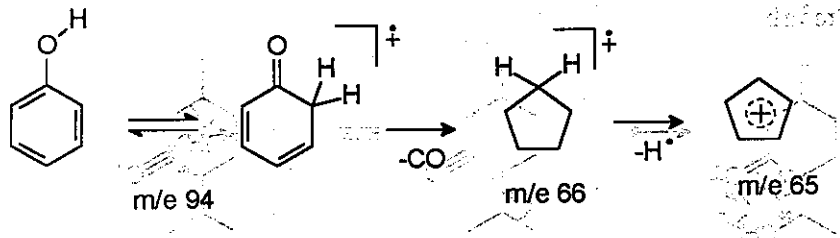
Hình 5.14 Phổ khối lượng của phenol.

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 10003 TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

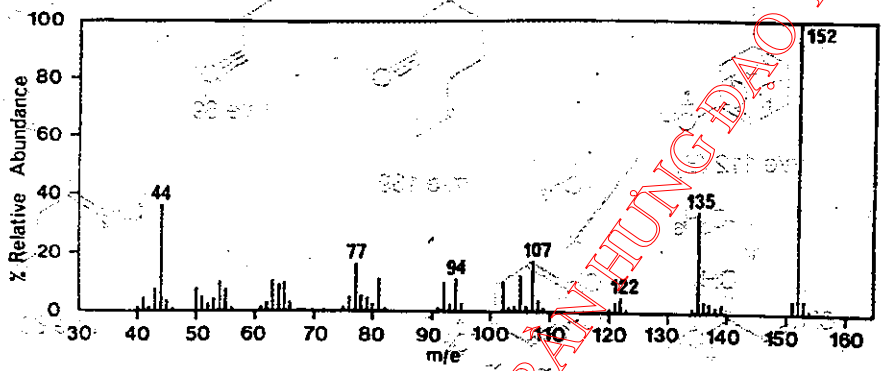
WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Cơ chế phân mảnh:



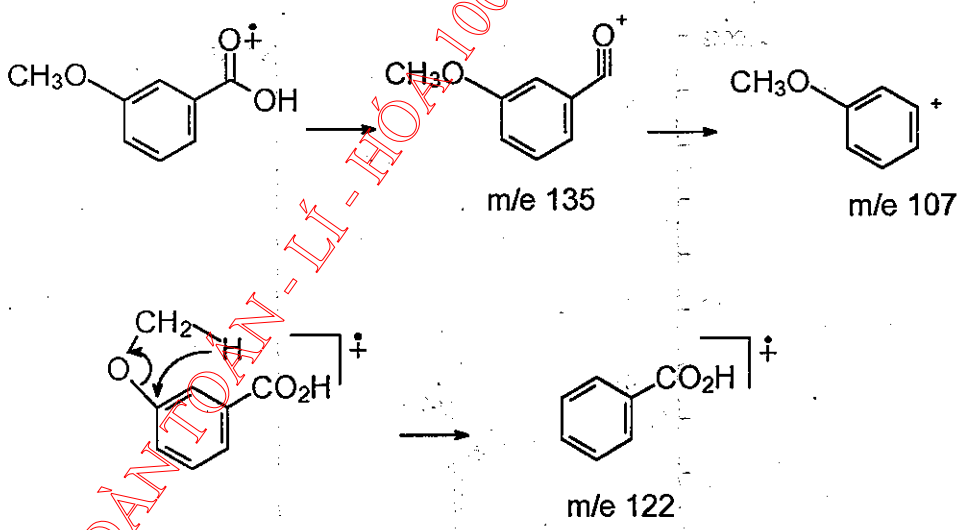
4- Axit cacboxylic

Thường gặp tách OH (m/e 17) và tách COOH (m/e 45). Ví dụ phổ khối lượng của axit *m*-metoxibenzoic *(hình 5.15)*.



***Hình 5.15** Phổ khối lượng của axit m-metoxibenzoic.*

Cơ chế phân mảnh:



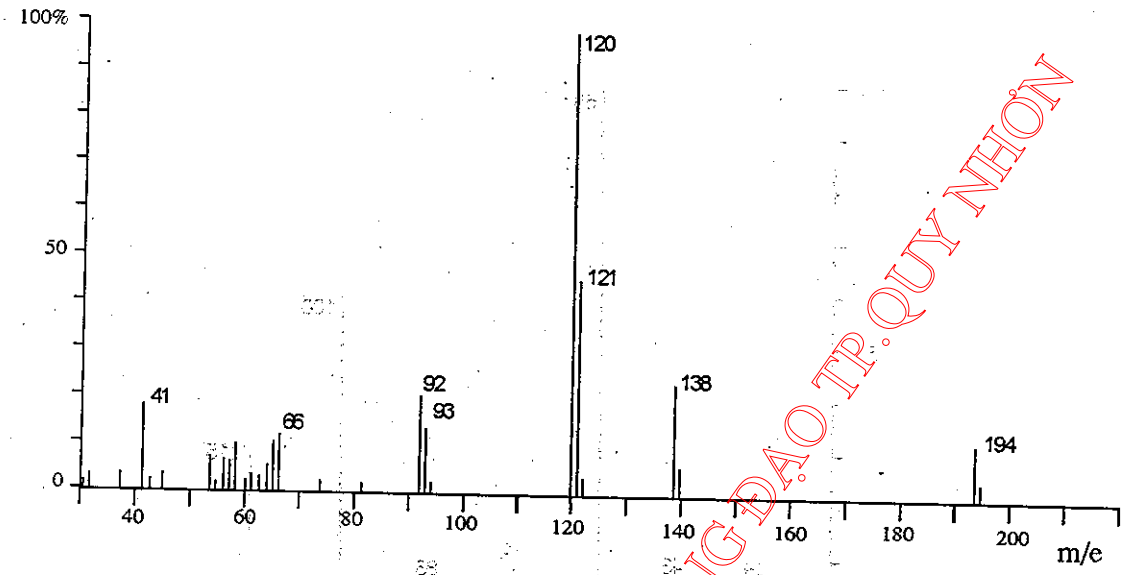
5- Este của axit cacboxylic

Số khối thường gặp là m/e 61, 75, 89, 103, ...Ví dụ phổ khối lượng của n-butyl salixylat *(hình 5.16)*.

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

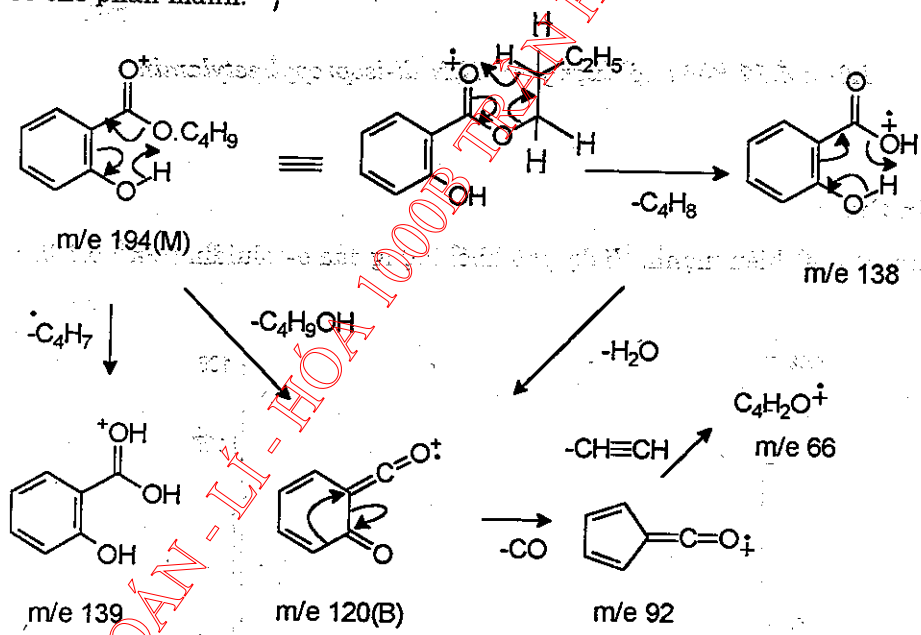
https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM



Hình 5.16 Phổ khối lượng của n-butyl salixylat.

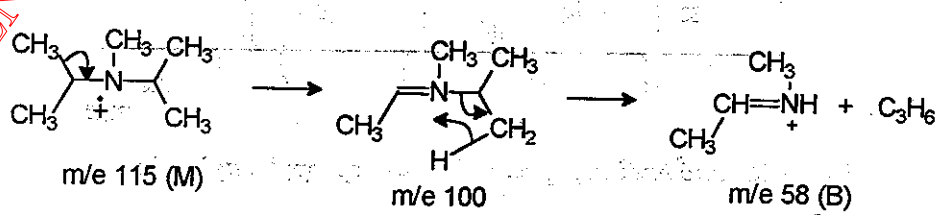
Cơ chế phân mảnh:



6- Amin thẳng

Số khối thường gặp là m/e 30, 44, 58, 72, ...Ví dụ phổ khối lượng của N,N-đi-isopropylmetylamin *(hình 5.17)*.

Cơ chế phân mảnh:



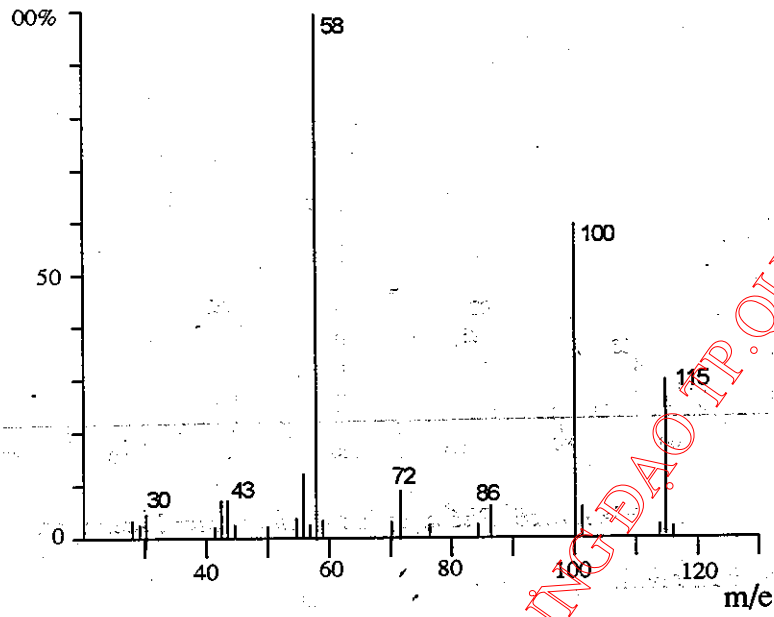
DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 10000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org

Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú

WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

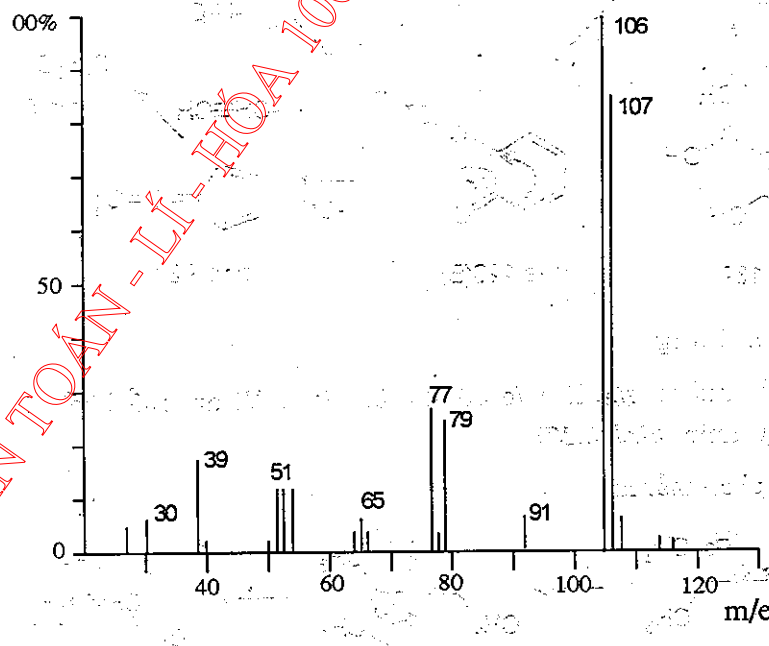
WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM



Hình 5.17 Phổ khối lượng của N,N-đi-isopropylmetylamin.

7- Amin thơm

Ion phân tử xuất hiện mạnh. Ví dụ phổ khối lượng của o-toluidin *(hình 5.18)*.



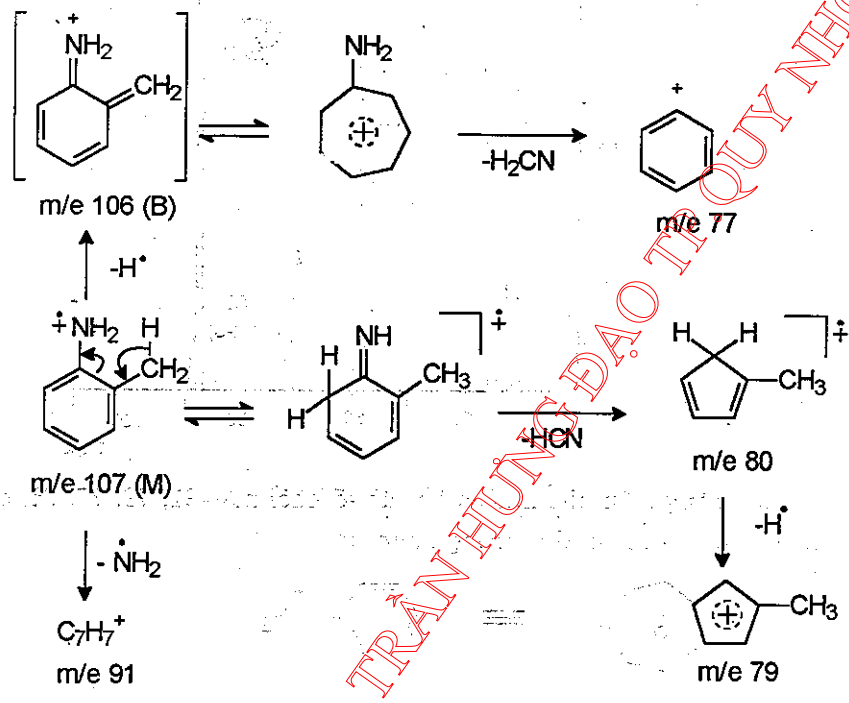
Hình 5.18 Phổ khối lượng của N,N-đi-isopropylmetylamin.

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Cơ chế phân mảnh:



5.6. Một số ví dụ về phương pháp phân tích phổ khối lượng

Ví dụ 1:

Xác định công thức cấu tạo của một số hợp chất có công thức cộng C_7H_8O và phổ khối lượng ở hình dưới:

Giải:

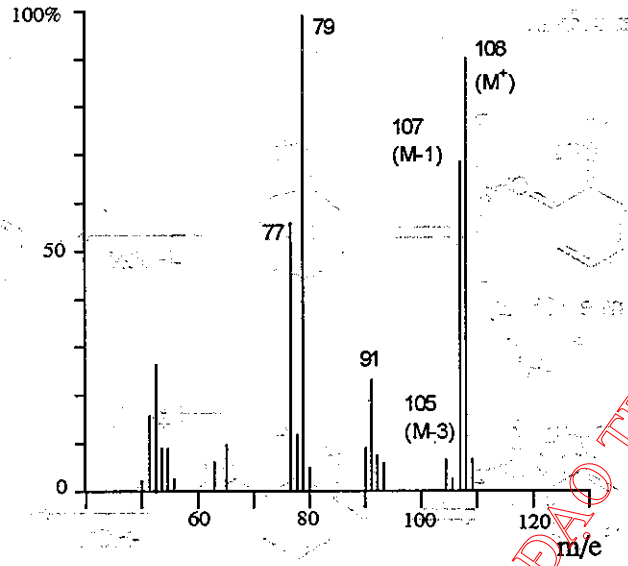
Trước tiên lập bảng hiệu số số khối m/e rút từ phổ ra:

m/e	108	107	91	79	77
107	1				
91	17	16			
79	29	28	12		
77	31	30	14	2	
65	43	42	26	14	12

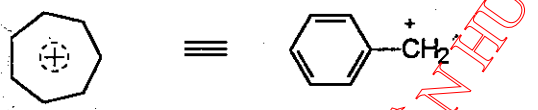
DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

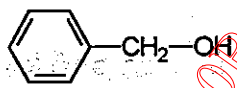
WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM



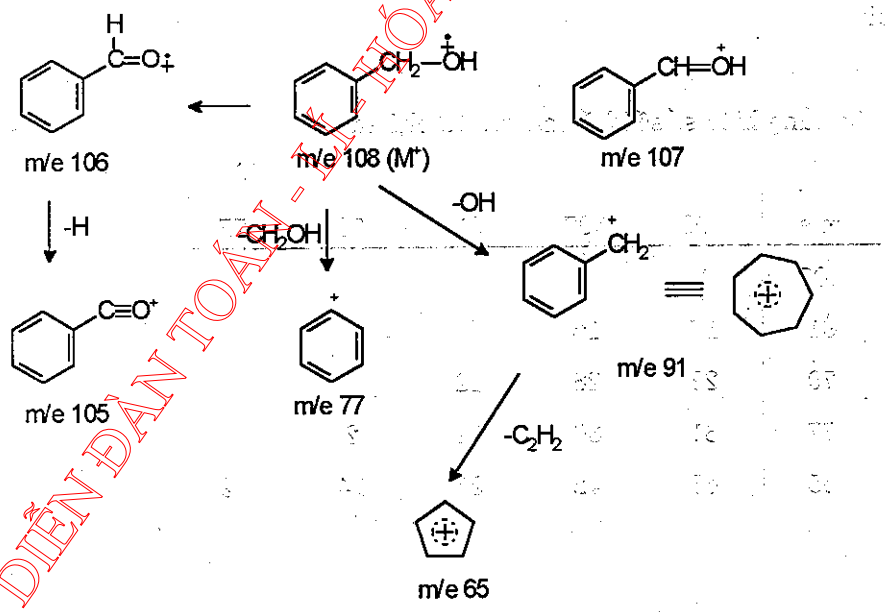
Ta nhận thấy rằng trên phổ xuất hiện các số khối m/e=91, 79, 77, 65, điều này chứng tỏ có vòng benzen gắn với nhóm CH_2 trong phân tử:



Từ M^+=108 chuyển về m/e=91 cắt đi 17 tức nhóm -OH do đó phân tử có cấu tạo là



Dựa vào các giá trị m/e trên phổ chứng minh lại cấu tạo giả thiết qua cơ chế phá vỡ phân tử như sau:

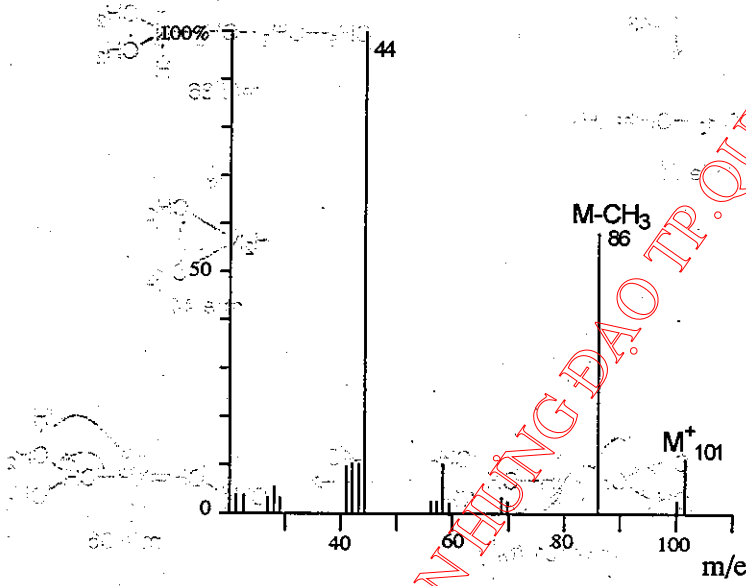


DIỄN ĐÀN TOÁN - LÝ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

Ví dụ 2:

Xác định công thức cấu tạo của chất có công thức cộng $C_6H_{15}N$ và phổ khối lượng ở hình dưới:



Giải:

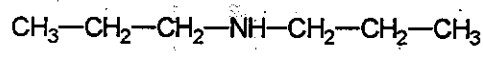
Lập bảng hiệu số m/e:

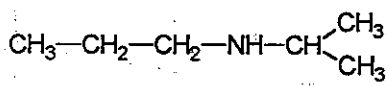
m/e	101	86	58	44
86	15			
58	43	28		
44	57	42	14	
29	72	57	29	15

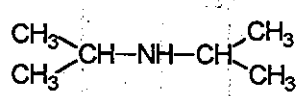
Ta hãy xét:

- Từ m/e=101 về 86 cắt 15 là nhóm $-CH_3$
- Từ m/e=101 về 58 cắt 43 là nhóm $-C_3H_7$
- Công thức tổng $C_6H_{15}N$=101, cắt C_3H_7 còn C_3H_8N=58, tức nhóm C_3H_7-NH-, do đó công thức của nó là C_3H_7-NH-C_3H_7.

Giả thiết có các công thức cấu tạo sau:


(1)


(2)

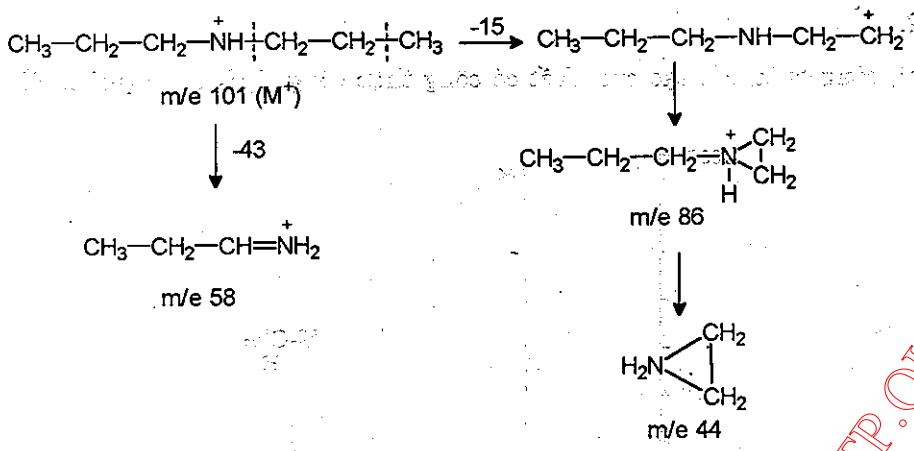

(3)

Từ các số liệu phổ khối phân biệt ba công thức này rất khó, vì cơ chế phân cắt của chúng đều có thể giải thích được từ các giá trị m/e trên phổ khối lượng. Ví dụ:

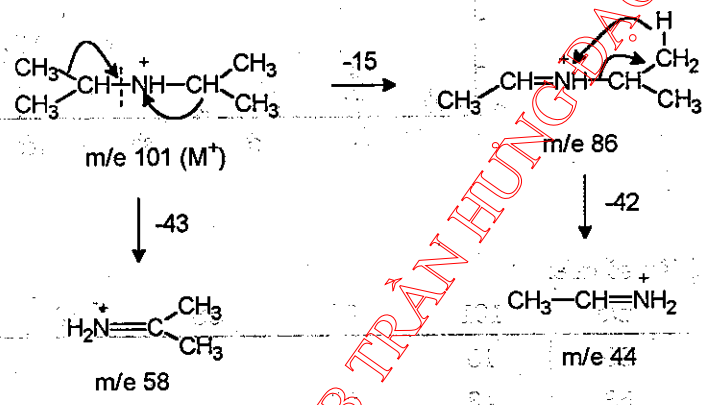
DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000D TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM



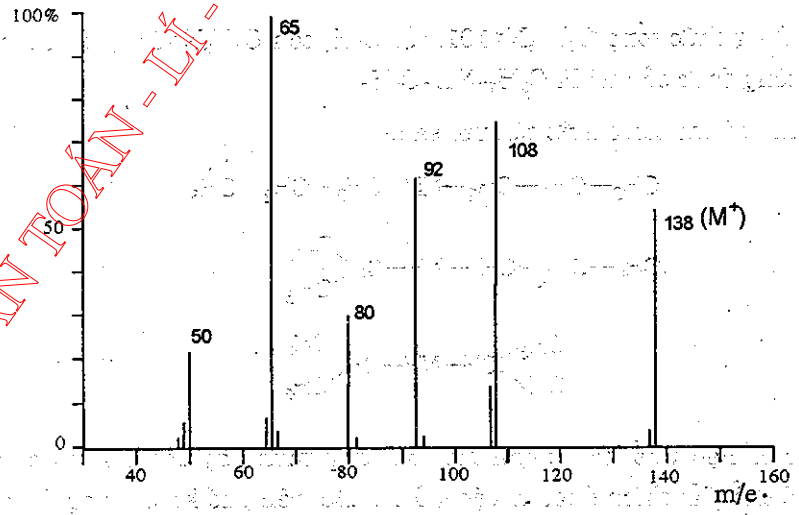
hoặc:



Vì vậy để khẳng định công thức nào là đúng thì cần phải kết hợp với phương pháp phổ khác (phổ hồng ngoại hay phổ cộng hưởng từ hạt nhân).

Ví dụ 3:

Xác định công thức cấu tạo của chất có công thức cộng $C_6H_6N_2O_2$ và phổ khối lượng ở hình dưới:



DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP.QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

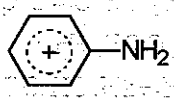
WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Giải:

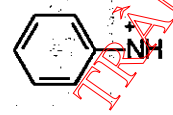
Lập bảng tính hiệu số m/e:

m/e	138	108	92	80	65
108	30				
92	46	16			
80	58	28	12		
65	43	43	27	15	
51	87	57	41	29	14

- Từ M^+=138 về m/e 108 cắt 30 là nhóm -N=O
- Từ M^+=138 về m/e 92 cắt 46 là nhóm $-NO_2$
- Từ công thức cộng $C_6H_6N_2O_2$ trừ đi NO_2 còn C_6H_6N, chứng tỏ có vòng benzen gắn với nhóm thế chứa nitơ:

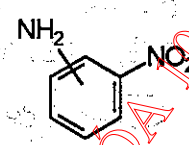


hay

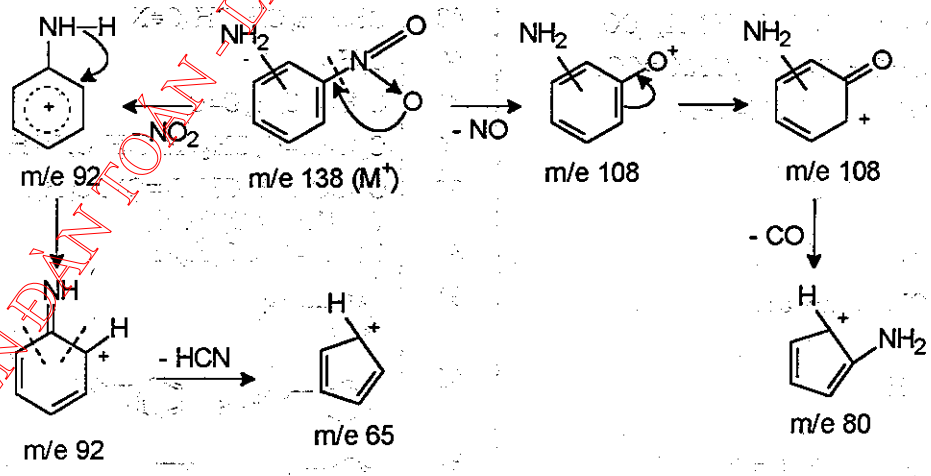


với m/e=92

do đó có thể giả thiết công thức cấu tạo của nó là:



Giải thích cơ chế phá vỡ phân tử:



Vậy công thức trên là phù hợp.

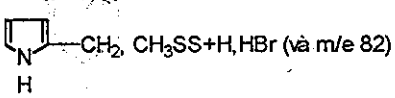
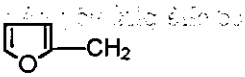
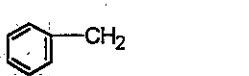
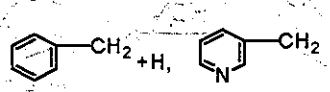
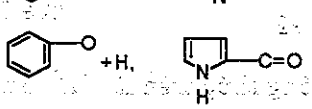
DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 10003 TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org

Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Bảng 5.2 Bảng số khối của một số mảnh ion.

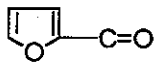
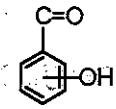
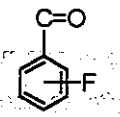
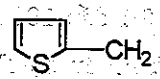
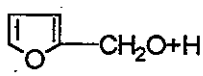
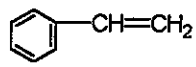
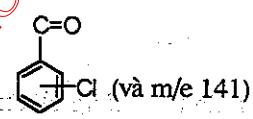
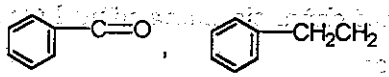
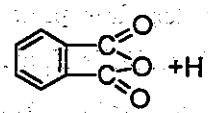
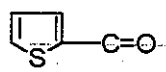
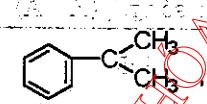
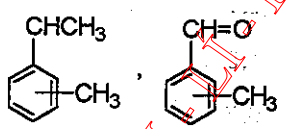
m/e	Mảnh ion	m/e	Mảnh ion
14	CH_2	56	C_4H_8, C_3H_4O
15	CH_3	57	C_4H_9, $C_2H_5C{=}O$
16	O, CH_4	58	$CH_3C(=O)CH_2$+H, $C_2H_5CHNH_2$, $(CH_3)_2NCH_2$, $C_2H_5NHCH_2$
17	OH, NH_3		
18	H_2O, NH_4	59	$(CH_3)_2COH$, $CH_2OC_2H_5$, $O{=}C{-}OCH_3$, $NH_2C(CH_2){=}O$+H
19	F		
20	HF	60	CH_2ONO, CH_2COOH+H
26	$C{\equiv}N$, C_2H_2	61	CH_2COOH+2H, CH_2SCH_3, CH_2CH_2SH
27	C_2H_3		
28	C_2H_4, CO, N_2	68	$CH_2CH_2CH_2C{\equiv}N$
29	C_2H_5, COH	69	C_5H_9, CF_3, C_4H_5O
30	CH_2NH_2, NO	70	C_5H_{10}
31	CH_2OH, OCH_3	71	C_5H_{11}, $C_3H_7C{=}O$
33	SH	72	$C_2H_5C(=O)CH_2$+H, $C_3H_7CHNH_2$
34	H_2S	73	$O{=}COC_2H_5$, $CH_2C(=O)OCH_3$
35	Cl (và m/e 37)	74	$CH_2C(=O)OCH_3$+H
36	HCl (và m/e 38)	75	$O{=}COC_2H_5$+2H, $CH_2SC_2H_5$
39	C_3H_3	77	C_6H_5
40	$CH_2C{\equiv}N$, Ar	78	C_6H_5+H
41	C_3H_5, $CH_2C{\equiv}N$+H	79	C_6H_5+2H, Br (và m/e 81)
42	C_3H_6, CH_2CO	80	 CH_2, CH_3SS+H, HBr (và m/e 82)
43	C_3H_7, $CH_3C{=}O$, CONH	81	
44	$CH_2CH{=}O$+H, CH_3CHNH_2, CO_2	82	$CH_2CH_2CH_2CH_2C{\equiv}N$
45	CH_3CHOH, CH_2CH_2OH, $O{=}CO$, CH_2OCH_3, $CH_3CH{=}O$+H	83	C_6H_{11}
		85	C_6H_{13}, $C_4H_9C{=}O$
46	NO_2	86	$C_3H_7C(=O)CH_2$+H, $C_4H_9CHNH_2$
47	CH_2SH, CH_3S	87	$O{=}COC_3H_7$, $CH_2C(=O)OC_2H_5$, $CH_3CHC(=O)OCH_3$
48	CH_3S+H	88	$CH_2C(=O)OC_2H_5$+H
49	CH_2Cl (và m/e 51)	91	
54	$CH_2CH_2C{\equiv}N$	92	
55	C_4H_7, $CH_2{=}CH{-}C{=}O$	94	

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÝ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

(*Bảng 5.2 - tiếp theo*)

m/e	Mảnh ion	m/e	Mảnh ion
95		121	
96	$CH_2CH_2CH_2CH_2CH_2C{\equiv}N$	123	
97	C_7H_{13}, 	127	I
98		128	HI
99	C_7H_{15}	131	C_3F_5
104	$C_2H_5CHONO_2$, 	139	
105		149	
111			
119	CF_2CF_3,  		

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org

Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Chương 6

PHƯƠNG PHÁP PHỔ TIA X

Một phát hiện quan trọng của nhà bác học Đức Rơnghen (1895) là nhận thấy từ ống phát tia âm cực có phát ra một bức xạ điện từ có khả năng xuyên qua một số tấm chắn, làm đen phim ảnh và ông đặt tên là tia X. Tia X có chiều dài bước sóng từ 0,1 đến 100 Å. Người ta phân chia ra 3 loại phương pháp: hấp thụ tia X, huỳnh quang tia X và nhiễu xạ tia X. Các phương pháp này đều có ứng dụng trong hoá phân tích.

6.1. Cơ sở lí thuyết

6.1.1. Nguồn phát tia X

Tia X sinh ra do một dòng electron có vận tốc cao tạo ra từ catot chuyển động đến và đập vào mặt một bia kim loại làm phát ra, tạo thành một chùm tia mang năng lượng cao đi ra ngoài. Chùm tia đó chính là tia X, còn bia kim loại là anot.

Bia kim loại có thể chế tạo bằng các kim loại khác nhau, nên chùm tia X phát ra có năng lượng khác nhau tức là có bước sóng khác nhau như:

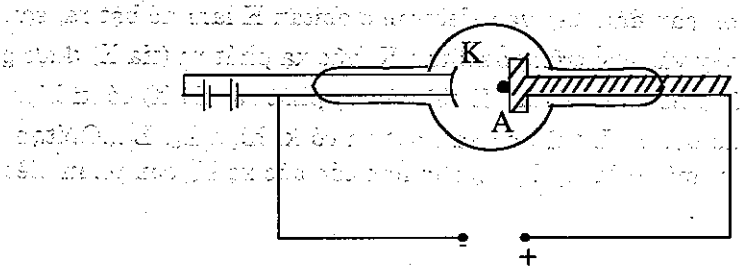
Vật liệu kim loại	Bước sóng λ (K_α, A)
Mg	9,5
Fe	1,7
Cu	1,5
Ag	0,7
W	0,5
U	0,1

Thiết bị dùng phát tia X gồm các bộ phận: một ống thuỷ tinh hay thạch anh kín có độ chân không cao, trong đó có catot K và anot A. Độ chân không của ống đạt 10^{-6}-10^{-7} mmHg. Catot K là sợi đốt làm bằng dây vonfram, khi được đốt nóng nhờ một nguồn điện, từ đây phát ra một chùm electron. Anot là một đĩa làm bằng vonfram hay platin đặt nghiêng 45° so với phương truyền của chùm electron. Trên đĩa có thể gắn các miếng kim loại khác nhau tuỳ theo yêu cầu. Điện áp đặt vào ống phát tia X rất cao tuỳ thuộc vào kim loại làm catot, ví dụ catot vonfram có thể vận hành ở điện áp tới 100 KV.

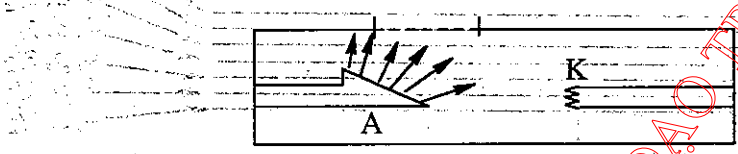
DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 10000 TRẦN HƯNG ĐẠO TP QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM



(a)



(b)

***Hình 6.1** Sơ đồ ống phát tia X*
K: catot, A: anot (bia).

6.1.2. Bản chất tia X

Bản chất của tia X có thể giải thích như sau:

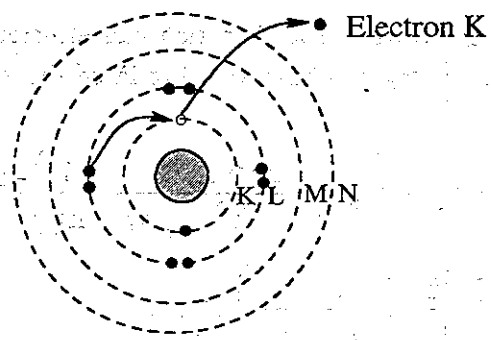
Nguyên tử có cấu tạo gồm hạt nhân và electron chuyển động trên các obitan bao quanh có kí hiệu *(hình 6.2)*:

n	1	2	3	4	5	...
	K	L	M	N	O	

Khi chùm electron có động năng lớn chuyển động đập vào bia kim loại, các electron này có thể đi sâu vào các obitan bên trong và làm bật electron nằm ở obitan nguyên tử ra khỏi vị trí của nó tạo ra chỗ trống. Sau đó các electron ở obitan bên ngoài nhảy vào các chỗ trống này, phát ra bức xạ tương ứng với mức năng lượng:

$$\Delta E = E_{n_1} - E_{n_2} \qquad (6.1)$$

E_{n_2} và E_{n_1} là năng lượng của electron ở obitan n_2 và n_1.



***Hình 6.2** Sơ đồ vỏ electron nguyên tử.*

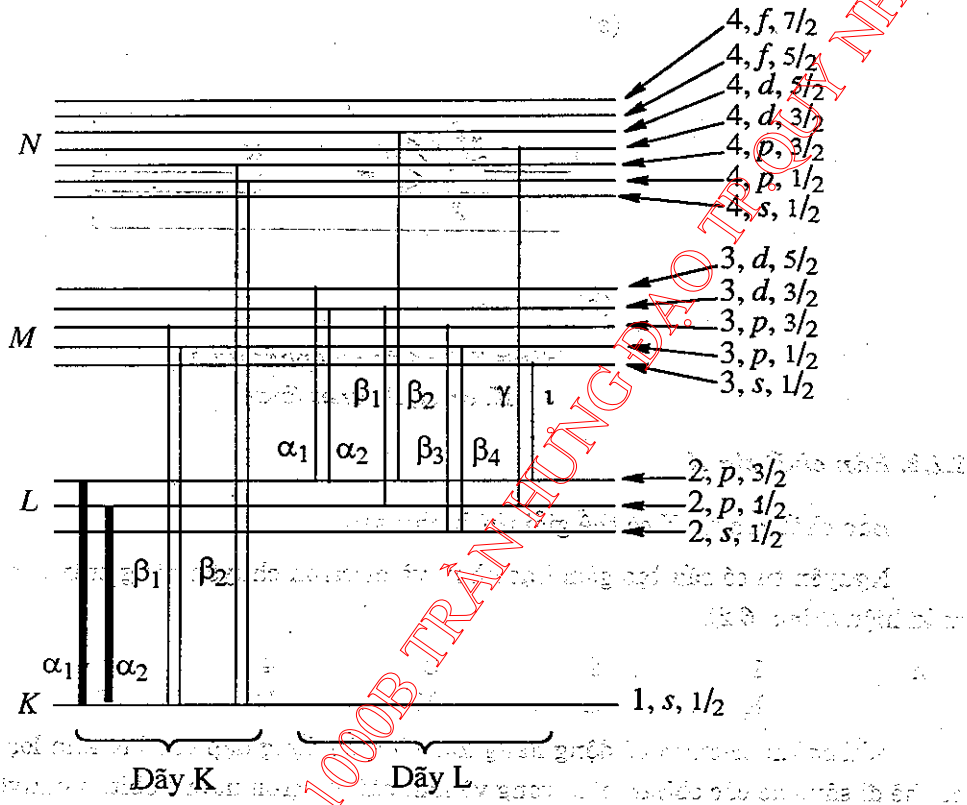
DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ HỌC 1000B TÂN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org

Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Giả dụ chùm electron ban đầu đập vào electron ở obitan K làm nó bật ra, sau đó electron ở các obitan phía ngoài nhảy vào chỗ trống ở obitan K, bức xạ phát ra (tia X) được gọi là bức xạ K. Electron từ obitan L, M nhảy vào obitan K thì bức xạ phát ra (tia X) có kí hiệu K_α, K_β. Khi electron từ ngoài nhảy vào obitan L thì bức xạ phát ra có kí hiệu L_α, L_β...Obitan L có một số mức năng lượng khác nhau một ít là L_1, L_2, L_3 cho nên các bức xạ K_α còn phân biệt K_{α_1}, K_{α_2}, K_{α_3} *(hình 6.3)*.



***Hình 6.3** Sơ đồ mức năng lượng obitan tương ứng với tia X phát ra.*

Năng lượng ΔE được tính dựa theo sự thay đổi mức năng lượng giữa các obitan. Năng lượng của electron ở các obitan được tính theo phương trình:

$$E_n = -\frac{2\pi^2 me^4}{h^2}\cdot\frac{Z^2}{n^2} \qquad (6.2)$$

ở đây: m là khối lượng electron, e là điện tích của electron, h là hằng số Planck,bằng $6{,}6256.10^{-27}$ erg.s, còn n là số lượng tử chính và cũng là số thứ tự của obitan, Z là số thứ tự nguyên tử.

Do đó:
$$\Delta E = E_{n_1} - E_{n_2} = -\frac{2\pi^2 me^4}{h^2}\left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2}\right)Z^2 = h\nu \qquad (6.3)$$

rút ra:
$$\nu = \frac{2\pi^2 me^4}{h^3}\left(\frac{1}{n_2^2} - \frac{1}{n_1^2}\right)Z^2 \qquad (6.4)$$

vì tốc độ ánh sáng: $c=\nu.\lambda$ nên có:

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÝ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{\nu}{c} \qquad (6.5)$$

từ (6.4) suy ra:

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{2\pi^2 me^4}{h^3 c}\left(\frac{1}{n_2^2} - \frac{1}{n_1^2}\right)Z^2 \qquad (6.6)$$

đặt $$R = \frac{2\pi^2 me^4}{h^3 c}$$

ta có: $$\frac{1}{\lambda} = R\left(\frac{1}{n_2^2} - \frac{1}{n_1^2}\right)Z^2 \qquad (6.7)$$

R được gọi là hằng số Rydberg.

Theo Mosley (Anh) thì giữa chiều dài sóng λ của tia X phát ra và số thứ tự của nguyên tử bị kích thích có mối liên quan với nhau theo biểu thức:

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{a}{c}(Z - \sigma)^2 \qquad (6.8)$$

ở đây c là tốc độ ánh sáng, a là hằng số, Z là số thứ tự nguyên tử, σ là hằng số phụ thuộc vào dãy phổ (ví dụ vạch K_α, K_β, L_α, L_β,...). Phương trình (6.8) chỉ ra rằng λ liên quan với số thứ tự nguyên tử chứ không phải khối lượng nguyên tử. Mối liên quan λ và Z có thể biểu diễn gần đúng theo biểu thức sau:

$$\lambda \approx \frac{A}{Z^2} \qquad (6.9)$$

ở đây A là hằng số đối với mỗi dãy K, L, M,.. ví dụ với dãy K thì A bằng 1300 và:

$$\lambda \approx \frac{1300}{Z^2} \qquad (6.10)$$

Hình 6.4 chỉ ra phổ tia X của bia kim loại vonfram (W) và crom (Cr) với thế kích thích ống phát tia X là 45 KV và 50 KV.

Hình 6.5 chỉ ra đường cong phổ tia X liên tục của một số nguyên tố kim loại ở 10 KeV, cường độ cực đại của chúng ở 1,8-2,0 Å.

Hình 6.6 chỉ ra phổ tia X của molipđen gồm có hai đỉnh nhọn ứng với bức xạ K_α và K_β và một đỉnh rộng và thấp gọi là bức xạ trắng, ngoài ra còn có một bước sóng cực tiểu (λ_{min}). Bước sóng này tương ứng với năng lượng cực đại của electron, λ_{min} còn gọi là bước sóng ngưỡng. Giá trị của nó tỉ lệ với thế kích thích ở ống phát tia X theo phương trình:

$$\lambda_{min} = \frac{hc}{V.e} \qquad (6.11)$$

ở đây h là hằng số Plank, c là tốc độ ánh sáng, e là điện tích electron và V là thế kích thích. Thay vào phương trình (6.11) nhận được:

$$\lambda_{min} = \frac{(6{,}62\text{x}10^{-27}\ \text{erg.s})(3\text{x}10^{10}\ \text{cm/s})\text{xvon.culong}}{(1{,}6\text{x}10^{-19}\ \text{culong})(\text{Vvon})\text{x}10^{7}\ \text{ergx}10^{-8}\ \text{cm}}\ \text{Å}$$

DIỄN ĐÀN TOÁN LÝ HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

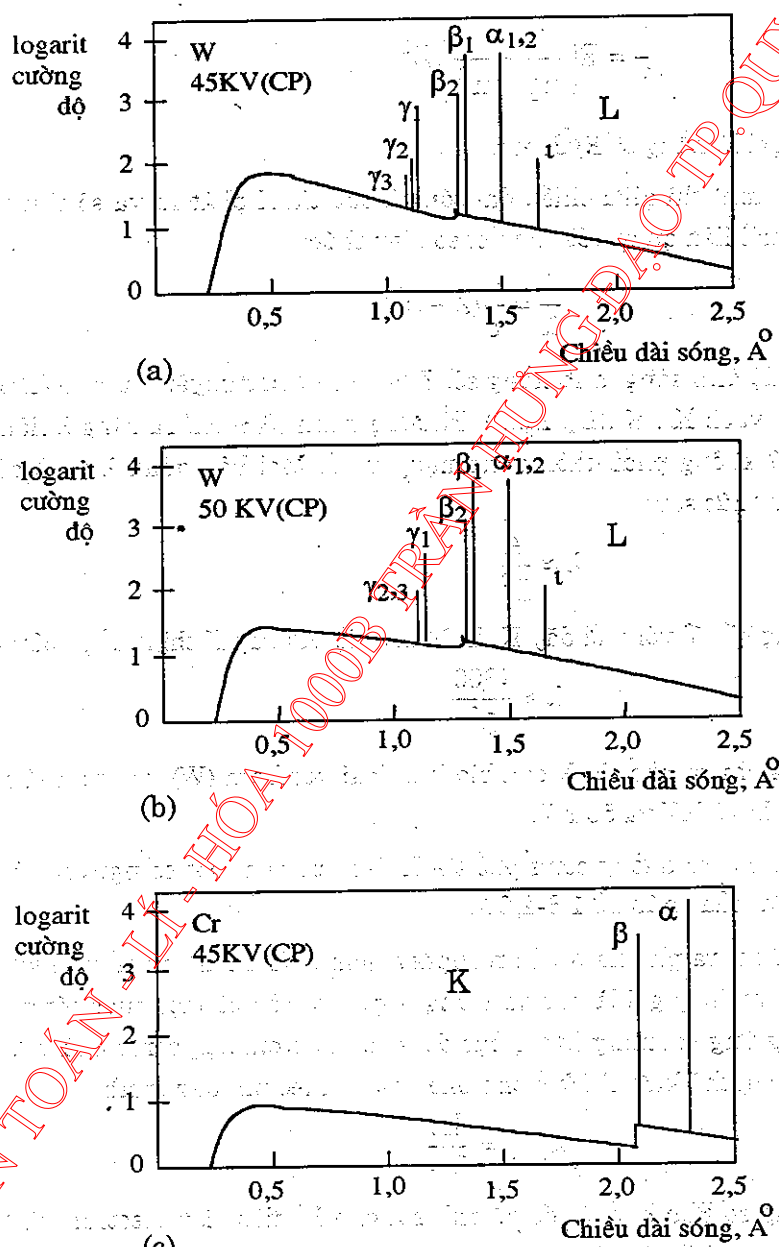
WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

tính ra được: $\lambda_{min} = \frac{12.400}{V}(\mathring{A})$ đơn vị của λ_{min} tính ra Angstron (Å).

Ví dụ thế kích thích của ống phát tia X là 62 KV thì chiều dài bước sóng λ_{min} là:

$$\lambda = \frac{12.400}{62.000V} = 0{,}2\,\mathring{A}$$

Bảng 6.1 cho các vạch đặc trưng của một số nguyên tố đặt ở anot dưới các điện áp kích thích khác nhau.

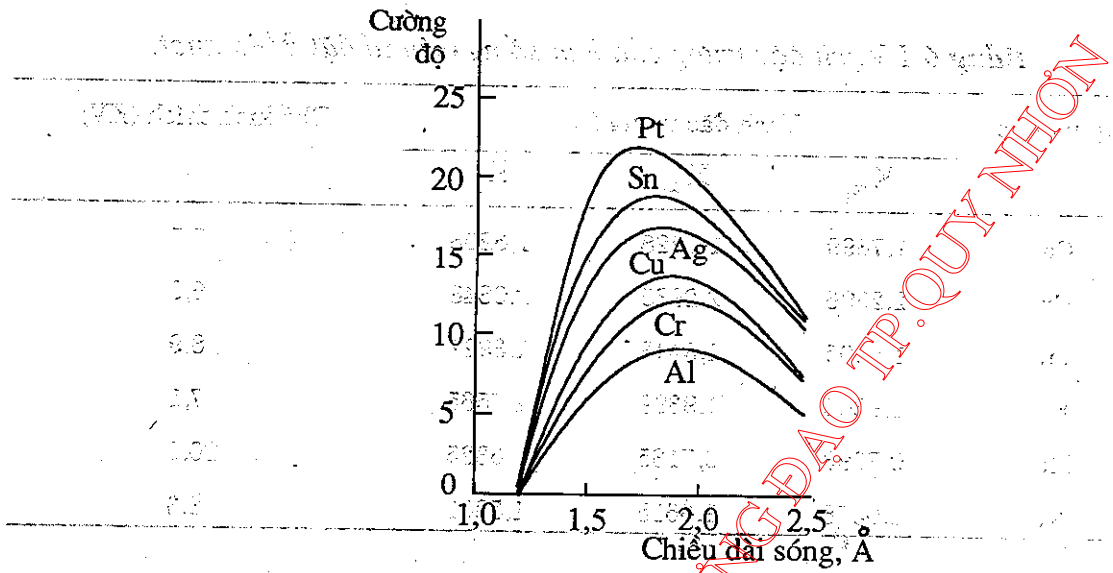


Hình 6.4. Phổ tia X của *a) bia W ở 45 KV (thế kích thích)*
b) bia W ở 50 KV
c) bia Cr ở 45 KV

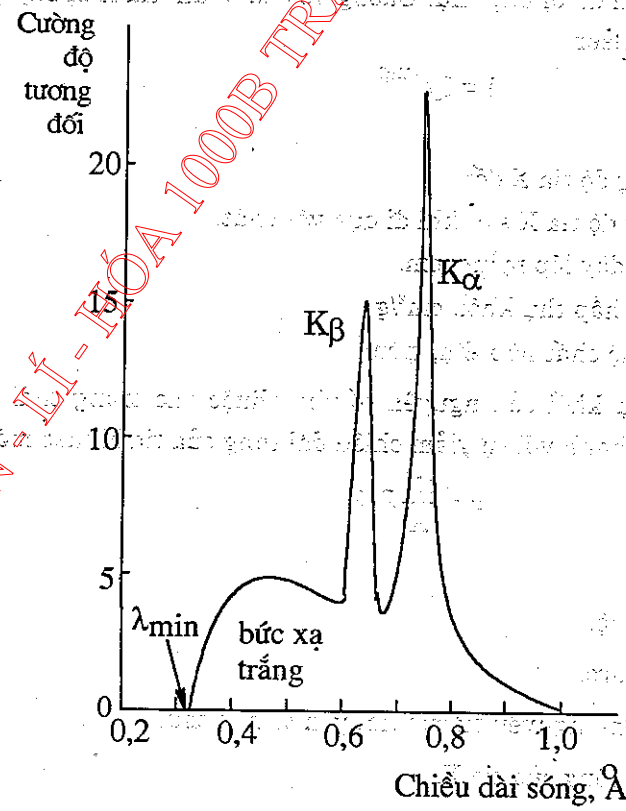
DIỄN ĐÀN TOÁN LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM



***Hình 6.5** Phổ tia X liên tục của một số bia kim loại với năng lượng 10 KeV.*



***Hình 6.6** Phổ tia X của molipđen.*

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP.QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Bảng 6.1 Vạch đặc trưng của một số nguyên tố đặt ở bia anot.

Nguyên tố	Vạch đặc trưng (A°)			Thế kích thích (KV)
	K_{α_1}	K_{α_2}	K_{β}	
Co	1,7899	1,7928	1,6208	7,7
Cr	2,2896	2,2935	2,0848	6,0
Cu	1,5405	1,5443	1,3921	8,9
Fe	1,9360	1,9399	1,7565	7,1
Mo	0,7093	0,7135	0,6325	20,0
Ni	1,6578	1,6618	1,5001	8,3

6.1.3. Sự tương tác của tia X với vật chất

Khi một chùm tia X đi qua một lớp vật chất, một phần năng lượng của nó bị mất đi do nhiễu xạ và một phần do bị hấp thụ. Cường độ của chùm tia X bị suy giảm do bị hấp thụ cũng tuân theo định luật Beer:

$$I = I_o e^{-\mu l \rho} \qquad (6.12)$$

ở đây:

I_o là cường độ tia X đến.

I là cường độ tia X sau khi đi qua vật chất.

l là chiều dày lớp mỏng, cm.

μ là hệ số hấp thụ khối, cm^2/g

ρ là mật độ chất hấp thụ, g/cm^3

Hệ số hấp thụ khối của nguyên tố phụ thuộc vào trạng thái vật lí của chất hấp thụ. Nhưng nó bị giảm nhanh với sự giảm chiều dài sóng của tia X theo mối quan hệ sau:

$$\mu = \frac{cN}{A} Z^4 \lambda^3 \qquad (6.13)$$

ở đây:

c là hằng số tỉ lệ.

N là số Avogadro.

A là trọng lượng nguyên tử của nguyên tố hấp thụ.

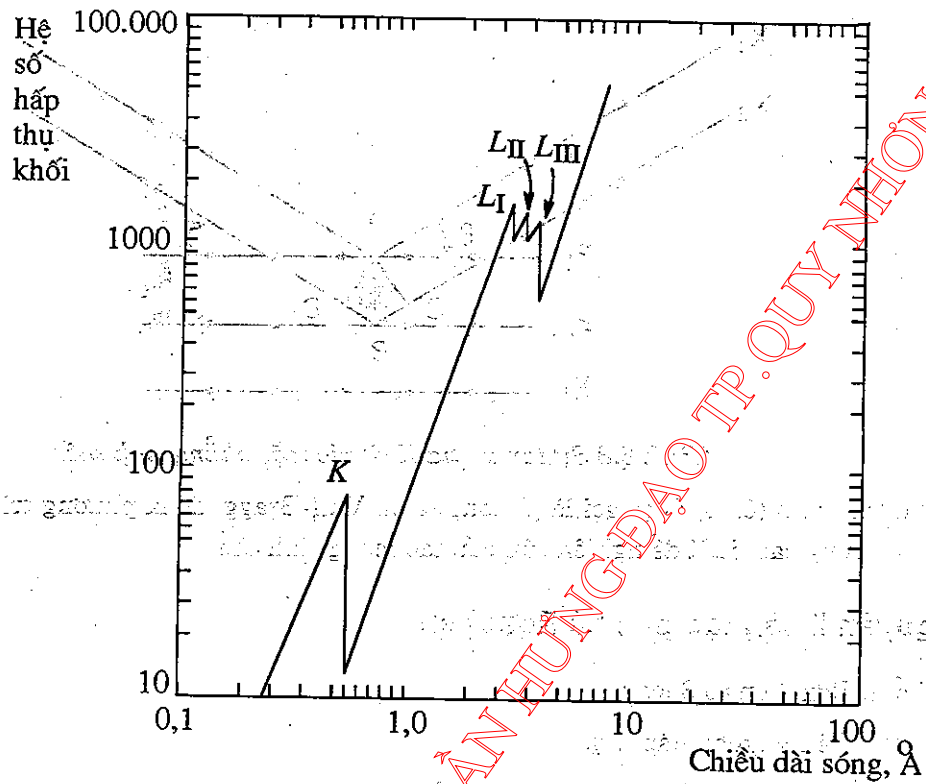
λ là chiều dài sóng của tia X.

Z là số thứ tự nguyên tố.

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM



Hình 6.7 *Đồ thị biểu diễn sự phụ thuộc của hệ số hấp thụ khối vào chiều dài sóng của molipđen (Mo).*

Đồ thị biểu diễn sự phụ thuộc của hệ số hấp thụ khối vào chiều dài sóng của tia X là một đường cong có các gấp khúc, mà các điểm gấp khúc ấy tương ứng với năng lượng cần thiết để kích thích electron từ obitan thấp lên obitan cao. Hình 6.7 chỉ ra đồ thị phụ thuộc của hệ số hấp thụ khối vào chiều dài sóng của molipđen. Các điểm gấp khúc tương ứng với bước nhảy electron từ lớp K và lớp L ra ngoài. Các điểm gấp khúc đó được gọi là bờ hấp thụ.

Phương trình Vulf-Bragg

Chùm tia X chiếu vào tinh thể tạo với mặt tinh thể một góc θ, khoảng cách giữa các mặt tinh thể là d. Trên hình 6.8, tia X đến điểm A và B của hai mặt tinh thể P_1 và P_2, sau đó phản xạ, trên các nút ở cùng mặt phẳng có cùng pha còn trên các nút ở hai mặt phẳng là khác pha. Giả dụ quang trình của hai tia X_1 và X_2 chiếu vào điểm A và B của hai mặt có hiệu số là $\overline{CB}+\overline{DB}$. Theo định luật giao thoa ánh sáng thì hiệu quang trình phải bằng số nguyên lần độ dài sóng:

$$n\lambda = \overline{CB}+\overline{DB}$$

đặt $\overline{CB}=\overline{DB}=l$

có $n\lambda=2l$

Từ tam giác ABC thấy: $l=d\sin\theta$ do đó:

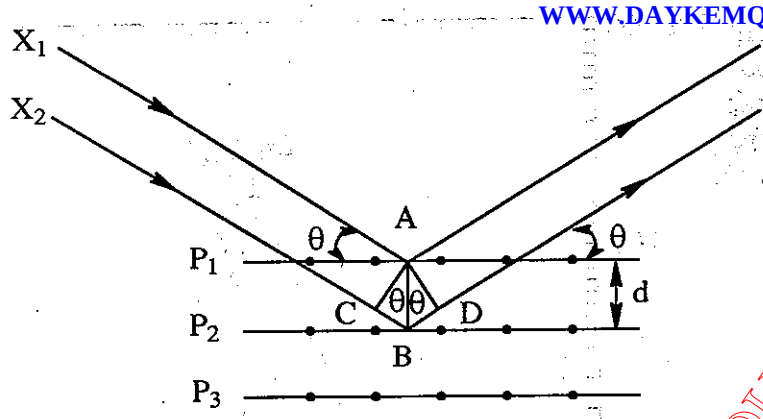
$$n\lambda=2d\sin\theta \qquad (6.14)$$

n là số nguyên.

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP.QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM



Hình 6.8 Sự tán xạ tia X từ các mặt phẳng tinh thể.

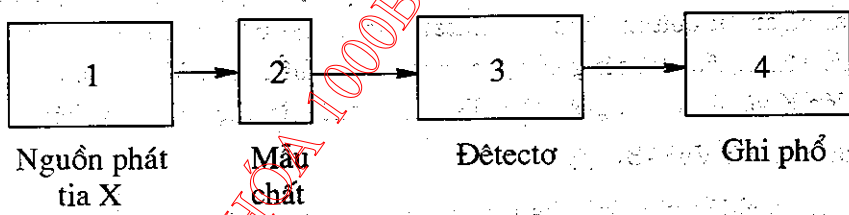
Phương trình (6.14) được gọi là phương trình Vulf-Bragg, đó là phương trình cơ bản cho việc đo bước sóng các tia X để nghiên cứu cấu tạo mạng tinh thể.

6.2. Nguyên lí cấu tạo phổ kế Rơnghen

Phổ kế Rơnghen có 3 loại:

- Phổ kế Rơnghen hấp thụ,
- Phổ kế Rơnghen huỳnh quang hay phát xạ,
- Phổ kế Rơnghen nhiễu xạ.

Sơ đồ chung của các loại phổ kế này có thể mô tả như sau: (1) nguồn phát tia X; (2) mẫu chất; (3) đêtectơ; (4) ghi phổ *(hình 6.9)*.



Hình 6.9 Sơ đồ khối phổ kế Rơnghen.

(1) Nguồn phát tia X: có tên gọi là ống tia X, được sản xuất theo yêu cầu chuyên dụng như sử dụng trong y tế, trong công nghiệp và trong hóa phân tích. Tùy theo anot được chế tạo bằng kim loại nào mà chùm tia X phát ra có bước sóng tương ứng *(xem bảng 6.1)*. Trong nhiễu xạ tia X thường dùng ống đồng (Cu), ống coban (Co), ống molipđen (Mo) và ống bạc (Ag). Căn cứ theo yêu cầu phân tích mà lựa chọn loại ống tia X thích hợp.

(2) Mẫu chất: mẫu đo phổ Rơnghen có thể ở dạng bột rắn, đơn tinh thể, bản mỏng, dạng lỏng và cũng có thể ở dạng khí. Tùy thuộc vào yêu cầu đo mà có phương pháp riêng chuẩn bị mẫu.

(3) Đêtectơ: kỹ thuật phát hiện và ghi lại các tín hiệu phổ tia X có thể thực hiện theo phương pháp chụp phim ảnh hay phương pháp ống đếm. Cả hai phương pháp này đều phụ thuộc vào khả năng của tia X ion hóa vật chất.

DIỄN ĐÀN TOÁN LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

a) Phương pháp chụp phim ảnh: Để ghi lại vị trí và cường độ tín hiệu tia X có thể sử dụng phương pháp chụp phim phẳng hay vòng. Độ đen của ảnh trên phim biểu hiện mối quan hệ:

$$D = \log \frac{I_o}{I}$$

I_o và I là cường độ tia X trước và sau khi đi qua mẫu, còn mật độ quang D được xác định theo phương pháp đo độ đen của ảnh.

Phương pháp chụp phim được sử dụng chủ yếu cho phương pháp nhiễu xạ tia X đo mẫu dạng bột hay đơn tinh thể.

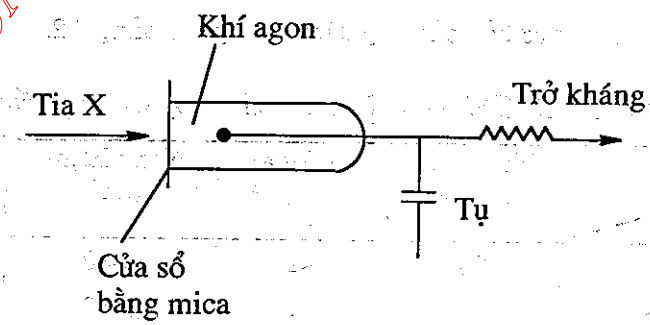
b) Phương pháp ống đếm: Ống đếm có chức năng ghi nhận số lượng tử của tia X nhiễu xạ đi qua ống đếm. Ống đếm lí tưởng là ghi được 100% số lượng tử tới và hiệu suất ghi không thay đổi theo năng lượng của mỗi lượng tử và tổng số lượng tử trong một đơn vị thời gian.

Có bốn loại ống đếm thường dùng:

- Ống đếm Geiger-Muller
- Ống đếm tỉ lệ
- Ống đếm nhấp nháy
- Ống đếm bán dẫn

Ống đếm Geiger-Muller

Sơ đồ ống đếm Geiger-Muller chỉ ra ở hình 6.10. Cấu tạo của ống đếm Geiger gồm một ống chứa đầy khí agon và một sợi dây đặt dọc theo tâm ống, duy trì một thế dương 800 đến 2500V. Khi chùm tia X chiếu vào ống Geiger sẽ đập vào lớp khí trong ống tạo thành ion và electron, electron sinh ra chuyển động đến anot còn ion dương ra điện cực phía ngoài. Electron được tăng tốc bằng gradien thế, gây ra sự ion hoá một số lớn nguyên tử agon dẫn đến hình thành một đám electron đi đến anot. Kết quả tạo ra một xung từ 1 đến 10V, có thể đo được dễ dàng nhờ một mạng điện đơn giản. Ống Geiger cho tín hiệu cao nhất đối với cường độ tia X. Nó còn khiếm khuyết là chỉ dùng để tính tốc độ thấp và hiệu suất giảm nhanh khi bước sóng nhỏ hơn 1Å. Vì biên độ của xung không phụ thuộc vào năng lượng tia X gây ra sự ion hoá, nên ống Geiger không dùng để đo năng lượng bức xạ ion hoá.



Hình 6.10 *Sơ đồ ống đếm Geiger-Muller.*

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 10 QUỐC TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

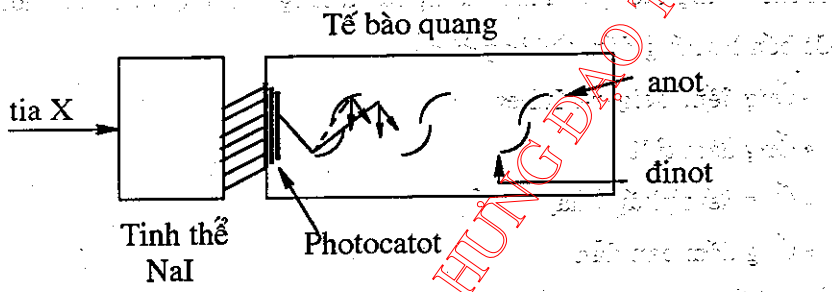
Ống đếm tỉ lệ

Ống đếm tỉ lệ có cấu tạo tương tự ống Geiger chỉ khác là khí đổ đầy ống là khí nặng hơn như xenon hay kripton; khí này dễ bị ion hoá. Ống đếm tỉ lệ vận hành ở thế thấp hơn ống Geiger. Xung đi ra từ ống đếm tỉ lệ thuận với cường độ chùm tia X đi vào ống đếm, có thể đo được nhờ một mạch riêng.

Thời gian đo của ống đếm rất ngắn (~0,2μs) có thể dùng để đo tốc độ cao. Độ nhạy và hiệu suất của nó tương tự ống đếm Geiger.

Ống đếm nhấp nháy

Hình 6.11 chỉ ra sơ đồ ống đếm nhấp nháy. Ống đếm gồm một tinh thể natri iođua lớn, khi X đập vào tinh thể, những xung của vùng ánh sáng nhìn thấy được phát ra và được phát hiện nhờ một tế bào quang điện.



Hình 6.11 *Sơ đồ ống đếm nhấp nháy.*

Ống đếm bán dẫn

Ống đếm bán dẫn gồm một lớp vật liệu loại n trên bề mặt một bản mỏng chất loại p. Electron sinh ra từ chùm tia X tạo ra một vùng dẫn và dòng điện tỉ lệ tuyến tính với năng lượng của chùm tia X chiếu vào ban đầu. Bất lợi của ống đếm bán dẫn là nó phải làm việc ở nhiệt độ rất thấp để tránh nhiễu.

Chỉ tiêu kĩ thuật của ống đếm được đánh giá theo :

- Hiệu suất đếm xung là tỉ số giữa xung đếm được và tổng số các xung đi đến ống đếm.
- Thời gian chết là thời gian ngắn nhất sau khi nhận được một xung của lượng tử trước và sẵn sàng đếm xung mới.
- Nền tín hiệu phải nhỏ so với tín hiệu.

Một số chỉ tiêu kĩ thuật cơ bản của ống đếm được ghi ở bảng 6.2.

Bảng 6.2 *Chỉ tiêu kỹ thuật của một số ống đếm.*

Chỉ tiêu / Loại ống đếm	Hiệu suất ghi (%)	Thời gian chết (μs)	Năng lượng (KeV)	Loại trừ tia huỳnh quang
Ống đếm tỉ lệ	60	<2	3-30	không
Ống đếm nhấp nháy	>90	~1	5-50	không
Ống đếm bán dẫn	>95	<1	2-50	có

Ghi chú: Ống đếm có hiệu suất ghi càng lớn và thời gian chết càng nhỏ thì càng tốt .

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

6.3. Kĩ thuật đo nhiễu xạ tia X

Phương pháp nhiễu xạ tia X được sử dụng để nghiên cứu cấu tạo, về mặt kĩ thuật có thể thực hiện theo các phương pháp sau:

(1) Phương pháp chụp ảnh Laue

(2) Phương pháp tia X Bragg

(3) Phương pháp đơn tinh thể quay

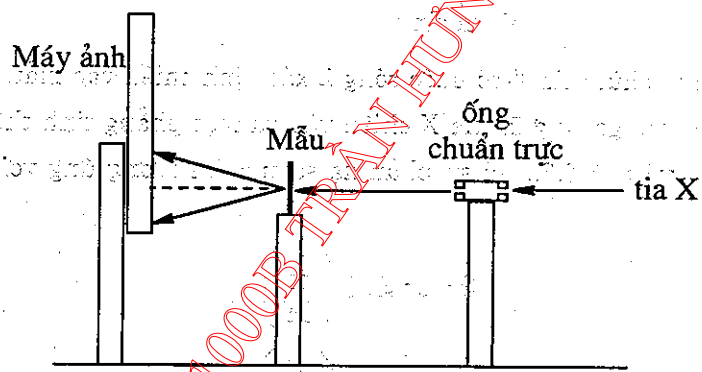
(4) Phương pháp bột

6.3.1. Phương pháp chụp ảnh Laue

Phương pháp chụp ảnh Laue có thể thực hiện theo hai cách khác nhau:

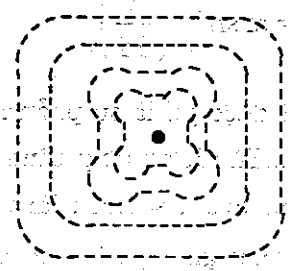
- Phương pháp truyền qua
- Phương pháp phản xạ ngược

a) Phương pháp truyền qua: Sơ đồ thiết bị đo được đặt theo hình 6.12, tia X đi qua ống chuẩn trực, đến mẫu và xuyên qua mẫu cho ảnh trên phim. Mẫu đo là đơn tinh thể.



Hình 6.12 *Sơ đồ thiết bị đo mẫu theo phương pháp truyền qua Laue.*

Ảnh Laue nhận được là các vết chấm hình êlip, khi chùm tia X đi dọc theo trục đối xứng của tinh thể *(hình 6.13)*. Các điểm ở trên cùng một vết êlíp được tạo ra bởi mặt phẳng thuộc về một họ, nghĩa là cùng song song với một hướng nhất định. Sự sắp xếp các vết nhiễu xạ cho thông tin về tính đối xứng của tinh thể nghiên cứu.



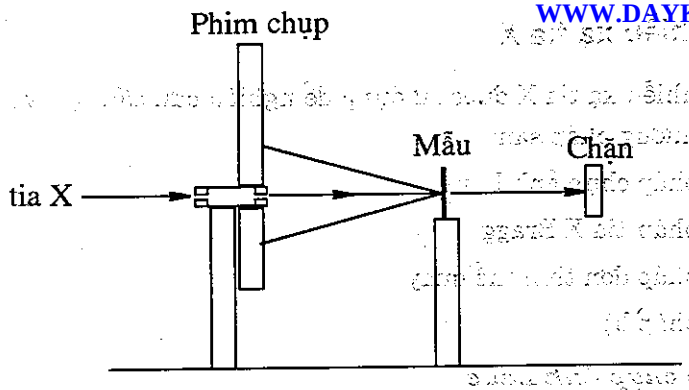
Hình 6.13 *Ảnh Laue của hệ lập phương đơn giản.*

b) Phương pháp phản xạ ngược của Laue tương tự phương pháp truyền qua chỉ khác bố trí ảnh ghi và nguồn phát tia X khác đi *(hình 6.14)*.

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM



Hình 6.14 Sơ đồ thiết bị đo theo phương pháp phản xạ ngược Laue.

6.3.2. Phương pháp tia X Bragg

Phương pháp này dựa trên phương trình Bragg:

$$n\lambda = 2d\sin\theta \qquad (6.14)$$

Khi dùng một chùm tia X có bước sóng λ xác định chiếu vào mẫu thì khả năng phản xạ cực đại phụ thuộc vào góc θ giữa tia X chiếu vào và mặt phẳng tinh thể. Nếu θ tăng đều đặn tương ứng với giá trị n=1,2,3...thì sự phản xạ sẽ cực đại tương ứng với các giá trị của θ như sau:

$$\theta = \arcsin 1.\left(\frac{\lambda}{2d}\right)$$

$$\theta = \arcsin 2.\left(\frac{\lambda}{2d}\right)$$

$$\theta = \arcsin 3.\left(\frac{\lambda}{2d}\right)$$

$$\ldots$$

$$\theta = \arcsin n.\left(\frac{\lambda}{2d}\right)$$

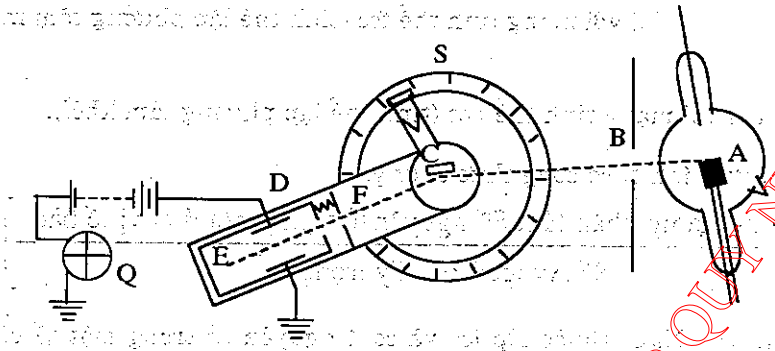
Sự phản xạ tương ứng với n=1 được gọi là sự phản xạ bậc 1, sự phản xạ tương ứng với n=2 được gọi là sự phản xạ bậc 2,v.v...Từ các phương trình trên nhận thấy rằng nếu θ đo được tương ứng với các giá trị n thì có thể tính được d vì chiều dài bước sóng λ của tia X chiếu vào đã biết. Cường độ của các đỉnh phổ thay đổi theo giá trị θ hay theo bậc phản xạ, do đó khi nghiên cứu cường độ của phổ tia X có thể nhận được các thông tin về sự sắp xếp các mặt phẳng của các nguyên tử khác nhau trong tinh thể.

Để đo được cường độ vạch phổ, Bragg đã chế tạo một thiết bị riêng như sơ đồ hình 6.15.

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 10,11,12B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

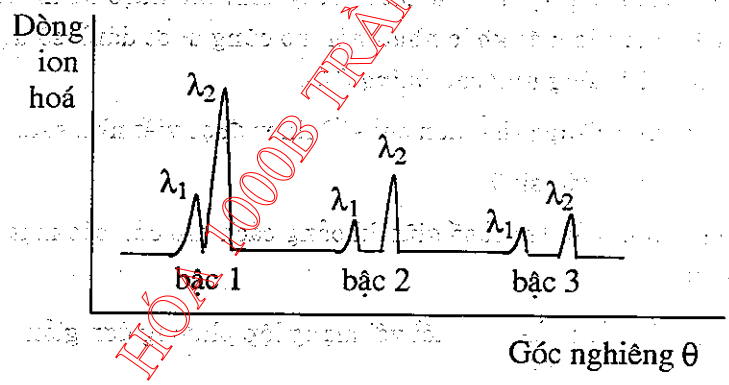
https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM



***Hình 6.15** Sơ đồ phổ kế tia X theo Bragg.*
A: ống phát tia X; B: khe vào; C: mẫu đo; D: ống đếm;
Q: điện kế tử cực đo cường độ dòng ion hoá; S: thang điều chỉnh góc θ.

Theo sơ đồ này thì chùm tia X có bước sóng xác định đi từ ống phát tia X đi vào mẫu đo (c) được đặt bên trong một máy ảnh tròn. Nhờ một bộ phận điều chỉnh góc θ, chùm tia phản xạ đi vào ống đếm (D), rồi biến thành tín hiệu điện, ghi sự phụ thuộc cường độ tia phản xạ theo góc θ. Vì góc θ được điều chỉnh tương ứng với các giá trị n nên trên phổ tia X nhận được các bước sóng λ có độ lớn thay đổi theo bậc phản xạ 1, 2, 3 tương ứng với các giá trị θ_1, θ_2, θ_3 *(hình 6.16).*



***Hình 6.16** Phổ tia X đo theo Bragg*
(cường độ tín hiệu phụ thuộc góc nghiêng θ).

Tính giá trị λ:

Từ phương trình (6.14) suy ra:

$$\frac{\lambda}{d} = \frac{2\sin\theta}{n}$$

Tỉ số λ/d được gọi là hằng số mạng. Từ đó thấy nếu biết được d có thể tính được λ vì θ và n đã xác định trên phổ tia X Bragg.

Tính giá trị d:

Giá trị d của tinh thể được tính theo mỗi loại tinh thể như:

$d = \frac{a\sqrt{2}}{2}$ đối với mạng tinh thể khối lập phương.

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

$d = \frac{a}{2}$ đối với mạng tinh thể fcc (tinh thể lập phương tâm mặt).

$d = \frac{a\sqrt{3}}{2}$ đối với mạng tinh thể bcc (tinh thể lập phương tâm khối).

Giá trị a được tính theo công thức chung:

$$a = \left[\frac{\text{Trọng lượng phân tử x Số nguyên tử trong một đơn vị tế bào}}{\text{Số Avogadro x Tỷ trọng}}\right]^{1/2}$$

Ví dụ tinh thể NaCl thuộc lớp fcc và có 4 nguyên tử trong một tế bào. Tỉ trọng của nó bằng 2,18g/cm^3 và trọng lượng phân tử M=58,5g. Số Avogadro là 6,023x10^{23}. Do đó:

$$a = \left[\frac{58,5x4}{6,02x10^{23}x2,18}\right]^{1/2} = 5,63x10^{-8}\text{cm}$$

từ đó tính được d đối với tinh thể dãy fcc như sau:

$$d = \frac{a}{2} = \frac{5,63x10^{-8}}{2} = 2,815x10^{-8}\text{cm} = 2,815\text{Å}$$

Xác định cấu trúc mạng tinh thể:

Theo lí thuyết tinh thể học thì các mặt mạng tinh thể được đánh chỉ số hkl gọi là chỉ số Miller, khoảng cách giữa các mặt khác nhau nên nó cũng được đánh số d_{hkl}, ví dụ khoảng cách giữa các mặt của tinh thể đồng như sau *(bảng 6.3)*.

Do đó phương trình Bragg thể hiện chỉ số Miller được viết như sau:

$$n\lambda = 2d_{hkl}\sin\theta$$

Theo phương trình trên thì tỉ số giữa khoảng cách d_{hkl} của các mặt trong mạng tinh thể có giá trị khác nhau:

$d_{100}:d_{110}:d_{111} = 1:\frac{1}{\sqrt{2}}:\frac{1}{\sqrt{3}}$ đối với mạng lập phương đơn giản

$d_{100}:d_{110}:d_{111} = 1:\frac{1}{\sqrt{2}}:\frac{2}{\sqrt{3}}$ đối với mạng tinh thể fcc (tinh thể lập phương tâm mặt)

$d_{100}:d_{110}:d_{111} = 1:\frac{2}{\sqrt{2}}:\frac{1}{\sqrt{3}}$ đối với mạng tinh thể bcc (tinh thể lập phương tâm khối)

***Bảng 6.3** Khoảng cách mạng tinh thể d_{hkl} của tinh thể đồng.*

Chỉ số hkl	Khoảng cách d_{hkl} (Å)
111	2,088
200	1,088
220	1,278
311	1,090
222	1,044
400	0,904
331	0,829
420	0,808

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 10000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Vì vậy, sau khi ghi ảnh nhiễu xạ, tính được giá trị d_{hkl}, đối chiếu với tỉ lệ trên có thể sắp xếp mẫu tinh thể đo được thuộc họ tinh thể nào. Ví dụ trường hợp muối NaCl, cường độ phản xạ cực đại tương ứng với các góc θ là 5,9°; 8,4° và 5,20° cho các mặt (100), (110) và (111) ứng với phản xạ bậc 1. Như vậy ta có:

$$d_{100}:d_{110}:d_{111}=\frac{1}{\sin 5,9}:\frac{1}{\sin 8,4}:\frac{1}{\sin 5,2}$$

$$=\frac{1}{0,128}:\frac{1}{0,146}:\frac{1}{0,906}$$

$$=1:0,704:1,155$$

$$=1:\frac{1}{\sqrt{2}}:\frac{2}{\sqrt{3}}$$

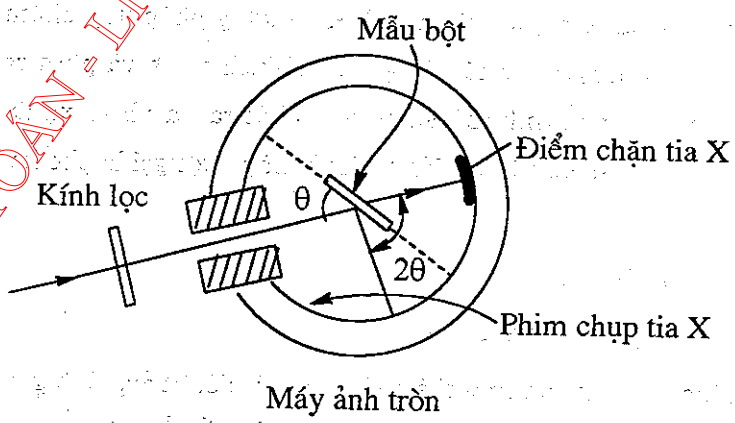
Đối chiếu với tỉ số d_{hkl} ở trên thấy tinh thể NaCl có mạng fcc.

6.3.3. Phương pháp đơn tinh thể quay

Mẫu nghiên cứu (đơn tinh thể) được giữ trên một trụ và có thể quay trong thời gian chiếu tia X qua. Sẽ có một cặp góc θ và khoảng cách d giữa các mặt tinh thể thỏa mãn phương trình Bragg. Ảnh nhiễu xạ là những lớp, từ các lớp này có thể tính được chu kì mạng và các hệ số [*hkl*] của mạng tinh thể.

6.3.4. Phương pháp bột

Ghi ảnh nhiễu xạ theo phương pháp bột được thực hiện bằng một máy ảnh tròn. Mẫu đo dạng bột (khoảng 1mg) được đặt ở tâm của máy ảnh. Chùm tia X chiếu vào mẫu và bị chặn lại ở phía sau. Tia X đến tạo góc θ với mẫu, còn chùm tia nhiễu xạ tạo một góc 2θ với hướng đi của tia X. Phim được cuộn tròn trong máy.



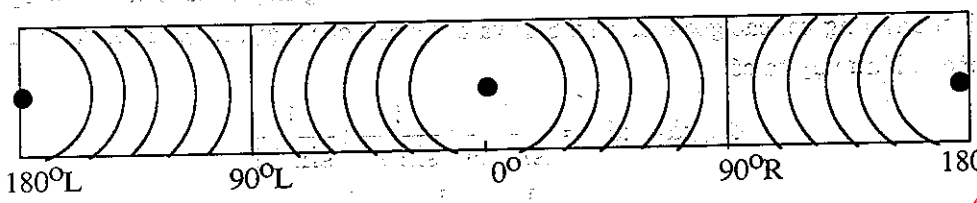
Hình 6.17 *Sơ đồ thiết bị chụp ảnh nhiễu xạ tia X dạng bột.*

Ảnh chụp nhiễu xạ tia X dạng bột là những vòng tròn đồng tâm tương ứng với góc chụp.

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 10 10B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM



Hình 6.18 Ảnh nhiễu xạ tia X chụp dạng bột.

Nếu phim cuộn tròn có bán kính *r*, chu vi của nó là 2πr tương ứng với góc 360° thì góc θ được tính theo:

$$\frac{l}{2\pi r} = \frac{2\theta}{360^\circ} \qquad (6.15)$$

suy ra

$$\theta = 360x\frac{l}{\pi r} \qquad (6.16)$$

Theo phương trình 6.16, θ chỉ có thể tính được khi biết l và r, và thay θ vào phương trình Bragg có thể tìm được giá trị d, khoảng cách giữa hai mặt phẳng tinh thể.

6.4. Phương pháp phân tích định tính tia X huỳnh quang

6.4.1. Phổ kế tán sắc chiều dài sóng

Phân tích định tính tia X có thể thực hiện theo phương pháp phân tích tia X sơ cấp hoặc theo phương pháp tia X huỳnh quang; nhưng theo cách phân tích tia X sơ cấp phải đặt mẫu vào bia kim loại trong ống phát tia X nên phức tạp, ít được sử dụng. Người ta thường sử dụng phương pháp phân tích tia X huỳnh quang. Theo phương pháp này chùm tia X sơ cấp được chiếu vào mẫu phân tích, nguyên tố có trong mẫu bị kích thích và phát ra các tia đặc trưng. Chùm tia X thứ cấp này đi qua tinh thể phân tích, phát ra tia nhiễu xạ đi đến phim ảnh, ghi lại ảnh nhiễu xạ tia X *(xem sơ đồ hình 6.19)*. Thiết bị này được gọi là phổ kế huỳnh quang tia X tán sắc chiều dài sóng.

Theo phương trình Bragg:

$$n\lambda = 2d\sin\theta$$

vì khoảng cách d giữa các mặt của tinh thể phân tích đã biết, (*bảng 6.4*) góc θ đo được trên máy cho nên có thể tính được chiều dài sóng λ của các nguyên tố mẫu phát ra.

Người ta cũng có thể dùng máy đếm để ghi lại phổ nhiễu xạ tia X thay cho phim ảnh.

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP QUY NHƠN

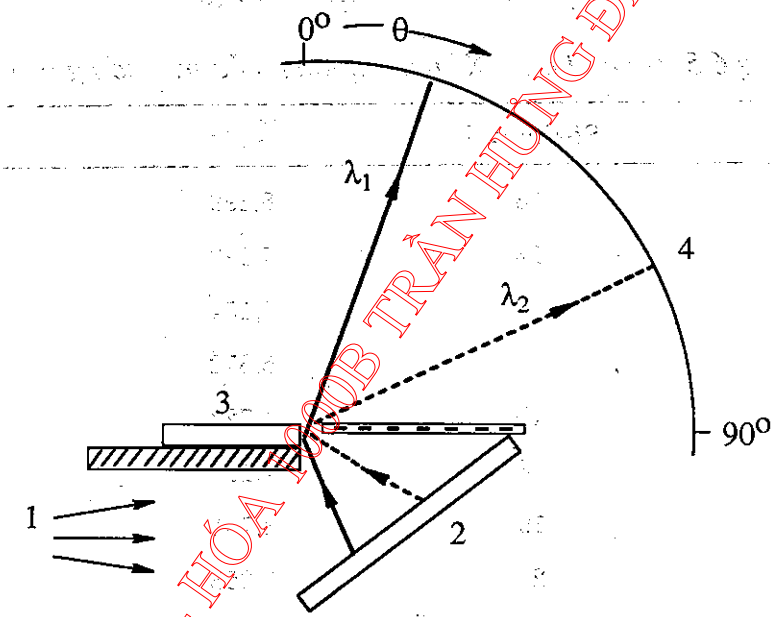
https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Bảng 6.4 *Tinh thể phân tích dùng trong máy phân tích tia X huỳnh quang.*

Tinh thể	2d, nm	Vùng sóng (Å)*	
		λ_{max}	λ_{min}
Thạch anh	0,1624		
Topaz	0,2712	2,67	0,24
Liti florua	0,4026	3,97	0,35
Natri clorua	0,5640	5,55	0,49
Etilenđiamin đitactrat	0,8803	8,67	0,77
Amoni đihiđrophotphat	1,0650	10,50	0,93
Kali hiđrophotphat	2,640		

* *λ_{max} và λ_{min} tương ứng với góc quét 2θ là 160° và 10°.*



Hình 6.19 *Sơ đồ thiết bị phân tích tia X huỳnh quang tán sắc chiều dài sóng dùng phim ghi ảnh nhiễu xạ*
1. tia X sơ cấp; 2- mẫu; 3-tinh thể phân tích;
4-phim ghi ảnh nhiễu xạ

Để phân tích nguyên tố cần chụp phổ tia X huỳnh quang mẫu chất, sau đó đối chiếu các vạch có cường độ mạnh K_α (ghi phổ với góc trượt 2θ từ 10° đến 140°) trước, sau đó xem thêm các vạch có cường độ yếu với phổ chuẩn của các nguyên tố tinh khiết, cần chú ý có thể có các vạch phổ tán xạ của vật liệu chế tạo ống phát tia X, vật liệu bộ chuẩn trực hay màng chắn.

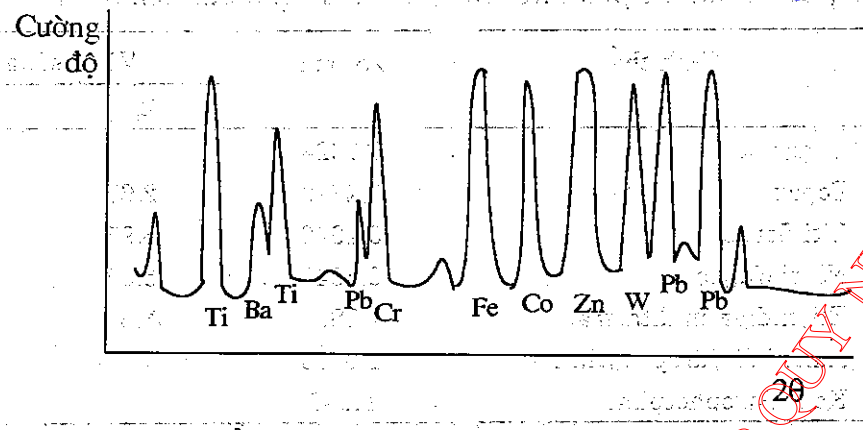
Bảng 6.5 cho vạch phổ đặc trưng K_{α_1} và K_{α_2} của một số nguyên tố.

Hình 6.20 chỉ ra phổ huỳnh quang tia X của một mẫu chưa biết. Chiều dài sóng được biểu thị qua góc tán xạ 2θ và có thể dễ dàng tính ra λ từ 2θ khi biết khoảng cách mặt tinh thể phân tích (theo công thức 6.14).

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 10Q10B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM



Hình 6.20 Phổ kế huỳnh quang tia X của một hợp kim ghi trên phổ kế tán sắc chiều dài sóng.

***Bảng 6.5** Vạch phổ tia X huỳnh quang của một số nguyên tố.*

Nguyên tố	Số thứ tự Z	K_{α_1} (Å)	K_{α_2} (Å)
Al	13	8,399	8,340
Si	14	7,123	7,128
P	15	6,154	6,157
S	16	5,372	5,375
Cl	17	4,727	4,730
Ar	18	4,191	4,194
K	19	3,741	3,744
Ca	20	3,358	3,361
Sc	21	3,031	3,034
Ti	22	2,748	2,752
V	23	2,503	2,507
Cr	24	2,289	2,293
Mn	25	2,102	2,106
Co	2	1,789	1,793
Ni	28	1,658	1,662

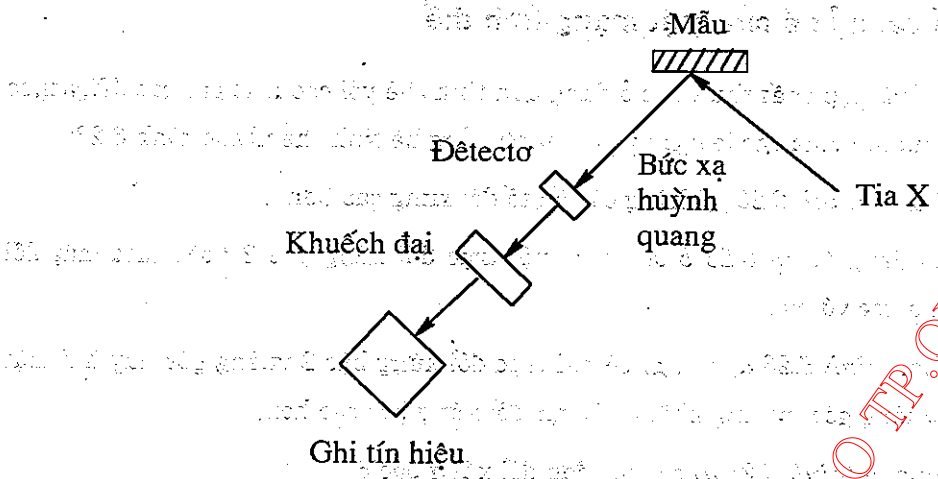
6.4.2. Phổ kế tán xạ năng lượng

Phổ kế huỳnh quang tia X còn được đo trên loại thiết bị khác là phổ kế huỳnh quang tia X tán xạ năng lượng *(hình 6.21)*. Phổ tia X nhận được thể hiện mối liên quan giữa cường độ tín hiệu và năng lượng tán xạ *(hình 6.22)*.

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM



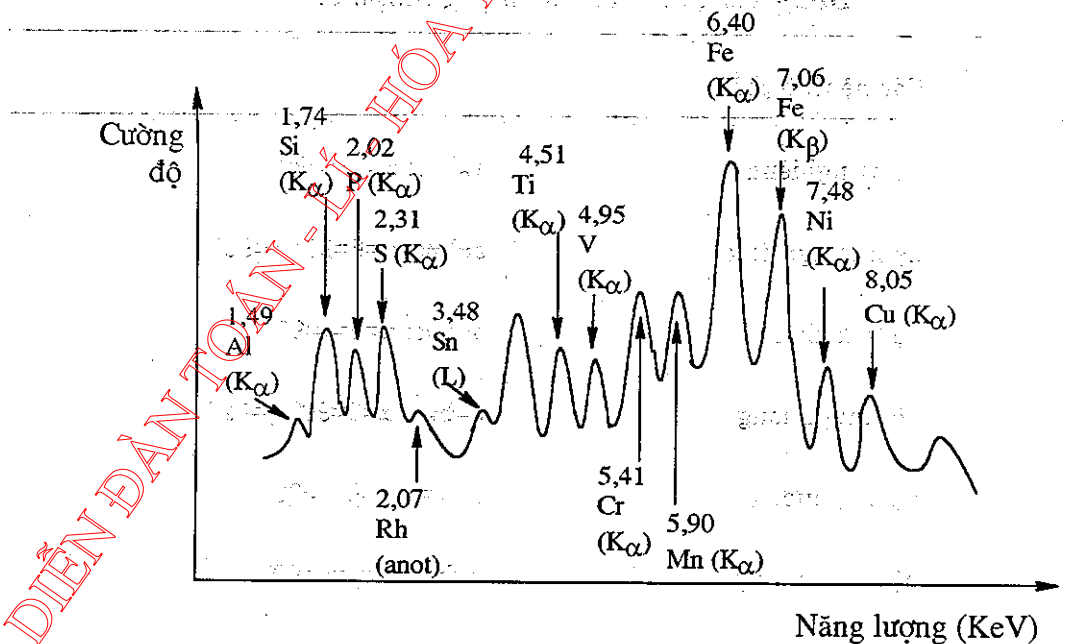
Hình 6.21 Sơ đồ phổ kế huỳnh quang tia X tán xạ năng lượng.

Theo phương pháp phổ huỳnh quang tia X đo trên phổ kế tán xạ năng lượng, phổ nhận được biểu diễn cường độ tín hiệu phụ thuộc năng lượng tán xạ (KeV). Từ phương trình $\Delta E=h\nu=hc/\lambda$ suy ra chiều dài sóng của tín hiệu phổ khi biết năng lượng (KeV).

Hình 6.22 chỉ ra phổ huỳnh quang tia X tán xạ năng lượng của một mẫu kim loại sắt có mặt một số kim loại khác (Si, Al, Ti, Cr, Ni,...) trong mẫu; trên các đỉnh đặc trưng cho các kim loại đều ghi giá trị năng lượng (KeV) tương ứng. Từ phổ này ta suy ra chiều dài sóng đặc trưng cho các nguyên tố kim loại theo công thức:

$$\lambda = \frac{hc}{\Delta E} = \frac{12,3981}{\Delta E(KeV)}(\text{Å})$$

ở đây h là hằng số Plank, c là tốc độ ánh sáng, λ và ΔE tỉ lệ nghịch với nhau.



Hình 6.22 Phổ của một mẫu sắt thu được trên phổ kế huỳnh quang tia X tán xạ năng lượng và ống anot Rh (các chữ số trên các đỉnh là năng lượng theo KeV).

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 10000 TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Nhiều nguyên tố và hợp chất thu được ở dạng đơn tinh thể với các mặt bậc cao. Tùy theo các yếu tố đối xứng người ta chia các loại tinh thể thành bảng hệ tinh thể như ở hình 6.23:

1- Hệ ba nghiêng *(hình 6.23a)* không có yếu tố đối xứng cao hơn 1.

2- Hệ một nghiêng *(hình 6.23 b và c)* có một trục đối xứng bậc 2 hoặc một mặt đối xứng vuông góc với nó.

3- Hệ trực thoi *(hình 6.23 d, e, f, g)* có hai trục đối xứng bậc 2 vuông góc hay hai mặt đối xứng vuông góc (nhưng không có trục đối xứng bậc cao hơn).

4- Hệ sáu phương *(hình 6.23 h)* có trục đơn đối xứng bậc 6.

5- Hệ ba phương *(hình 6.23 i)* có trục đối xứng bậc 3.

6- Hệ bốn phương *(hình 6.23 j, k)* có trục đơn đối xứng bậc 4.

7- Hệ lập phương *(hình 6.23 l, m, n)* có bốn trục đối xứng bậc 3 song song với đường chéo khối của lập phương.

Các mạng tinh thể được đặc trưng qua các thông số chiều dài cạnh a, b, c và độ lớn các góc α, β và γ. Các thông số này khác nhau đối với các hệ tinh thể *(xem hình 6.23 và bảng 6,6)*. Hình 6.24 chỉ ra cấu trúc tinh thể ionic đơn giản của các chất NaCl, CsCl và TiO_2.

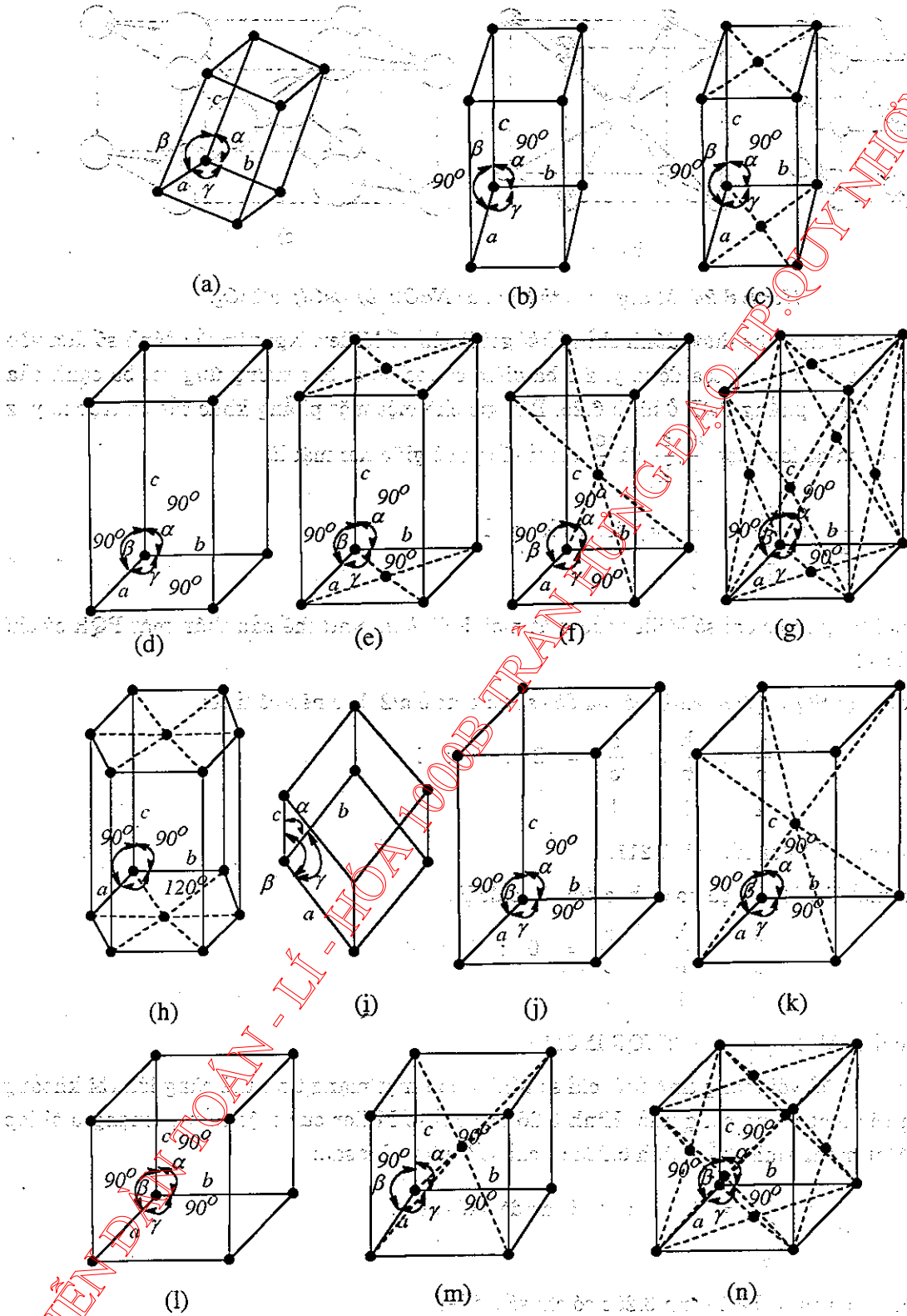
***Bảng 6.6** Các thông số mạng tinh thể.*

	Các hệ tinh thể	
1	hệ ba nghiêng	$a\neq b\neq c$; $\alpha\neq\beta\neq\gamma\neq 90°$
2	hệ một nghiêng	$a\neq b\neq c$; $\alpha=\beta=90°$, $\gamma\neq 90°$
3	hệ trực thoi	$a\neq b\neq c$; $\alpha=\beta=\gamma=90°$
4	hệ sáu phương	$a=b\neq c$; $\alpha=\beta=90°$, $\gamma=120°$
5	hệ ba phương	$a=b=c$; $\alpha=\beta=\gamma\neq 90°$
6	hệ bốn phương	$a=b\neq c$; $\alpha=\beta=\gamma=90°$
7	hệ lập phương	$a=b=c$; $\alpha=\beta=\gamma=90°$

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM



Hình 6.23 *Các hệ tinh thể*

(a) hệ ba nghiêng; (b-c) hệ một nghiêng; (d-g) hệ trực thoi; (h) hệ sáu phương; (i) hệ ba phương; (j) hệ bốn phương; (l-n) hệ lập phương.

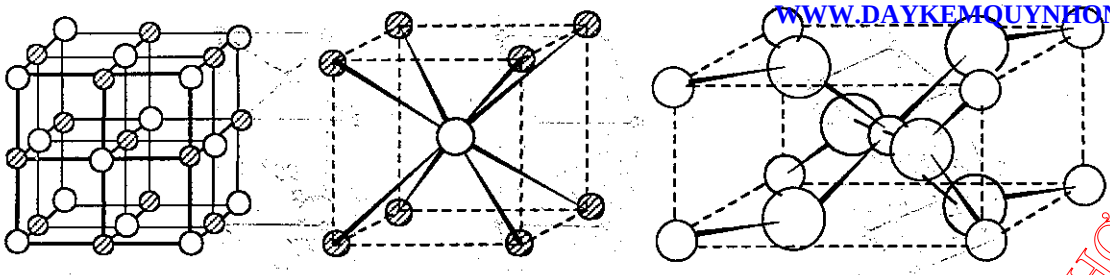
DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP.QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org

Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú

WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM



Hình 6.24 Mạng tinh thể của a) NaCl; b) CsCl; c)TiO_2.

Mặt mạng tinh thể được đánh chỉ số *hkl* gọi là chỉ số Miller. Nguyên tắc đánh số dựa vào mặt phẳng cắt ba trục hệ tọa độ x, y, z ở ba điểm có tọa độ a, b, c tương ứng với ba cạnh của tinh thể, như mặt phẳng PQR ở hình 6.25. Bây giờ cho một mặt phẳng khác cắt ba trục x, y, z ở ba điểm có tọa độ lần lượt $\frac{a}{h}, \frac{b}{k}$ và $\frac{c}{l}$ thì tỉ số tọa độ giữa hai mặt là:

$$\frac{a}{\frac{a}{h}} : \frac{b}{\frac{b}{k}} : \frac{c}{\frac{c}{l}} = h : k : l$$

Người ta qui ước chỉ số Miller của mặt mới đó là *hkl*. Như thế bản thân mặt PQR có chỉ số Miller là 111.

Ví dụ mặt SQR *(hình 6.25)* có tọa độ cắt ba trục ở a/2, b, c nên có tỉ số:

$$\frac{a}{\frac{a}{2}} : \frac{b}{\frac{b}{1}} : \frac{c}{\frac{c}{1}} = 2 : 1 : 1$$

Vậy chỉ số Miller của nó là 211.

Còn mặt TUQR có tọa độ ∞, b, c nên tỉ số đó là:

$$\frac{a}{\frac{a}{\infty}} : \frac{b}{\frac{b}{1}} : \frac{c}{\frac{c}{1}} = 0 : 1 : 1$$

và chỉ số Miller của mặt TUQR là 011.

Như vậy đối với mạng tinh thể, chỉ số Miller của mặt mạng tinh thể càng lớn thì khoảng cách giữa các mặt mạng càng nhỏ. Hình 6.26 cho chỉ số Miller của một số mặt mạng lưới lập phương. Mặt mạng tinh thể ở hình 6.26a có chỉ số Miller như sau:

$$\frac{a}{\frac{a}{\infty}} : \frac{b}{\frac{b}{b}} : \frac{c}{\frac{c}{\infty}} = 0 : 1 : 0$$ do đó *hkl* là 010.

Mặt mạng tinh thể ở hình 6.26b có chỉ số Miller

$$\frac{a}{\frac{a}{a}} : \frac{b}{\frac{b}{b}} : \frac{c}{\frac{c}{\infty}} = 1 : 1 : 0$$ do đó *hkl* là 110.

DIỄN ĐÀN TOÁN LÝ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Khoảng cách giữa các mặt mạng tinh thể cũng được đánh chỉ số *hkl*. Bảng 6.7 cho khoảng cách mặt d_{hkl} của một vài mạng tinh thể.

***Bảng 6.7** Khoảng cách mặt d_{hkl}.*

1- Mạng lập phương:

$$\frac{1}{d^2}=\frac{1}{a^2}\left(h^2+k^2+l^2\right)$$

2- Mạng bốn phương:

$$\frac{1}{d^2}=\frac{h^2+k^2}{a^2}+\frac{l^2}{c^2}$$

3- Mạng trực thoi:

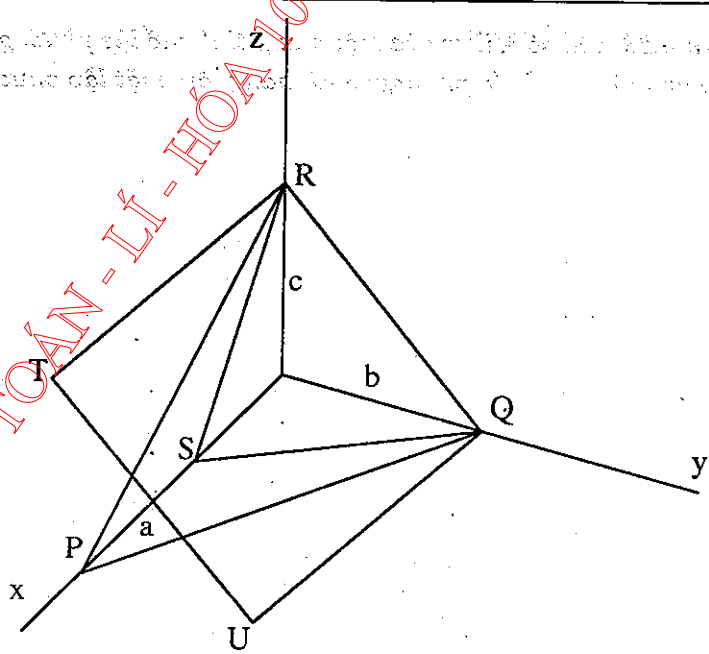
$$\frac{1}{d^2}=\frac{h^2}{a^2}+\frac{k^2}{b^2}+\frac{l^2}{c^2}$$

4- Mạng sáu phương và mặt thoi trong hệ trục của mạng sáu phương:

$$\frac{1}{d^2}=\frac{1}{a^2}\left[\frac{4}{3}\left(h^2+hk+k^2\right)+l^2\frac{a^2}{c^2}\right]$$

5- Mạng một nghiêng:

$$\frac{1}{d^2}=\frac{h^2}{a^2\sin^2\beta}+\frac{k^2}{b^2}+\frac{l^2}{c^2\sin^2\beta}-\frac{2hl\cos\beta}{ac\sin^2\beta}$$



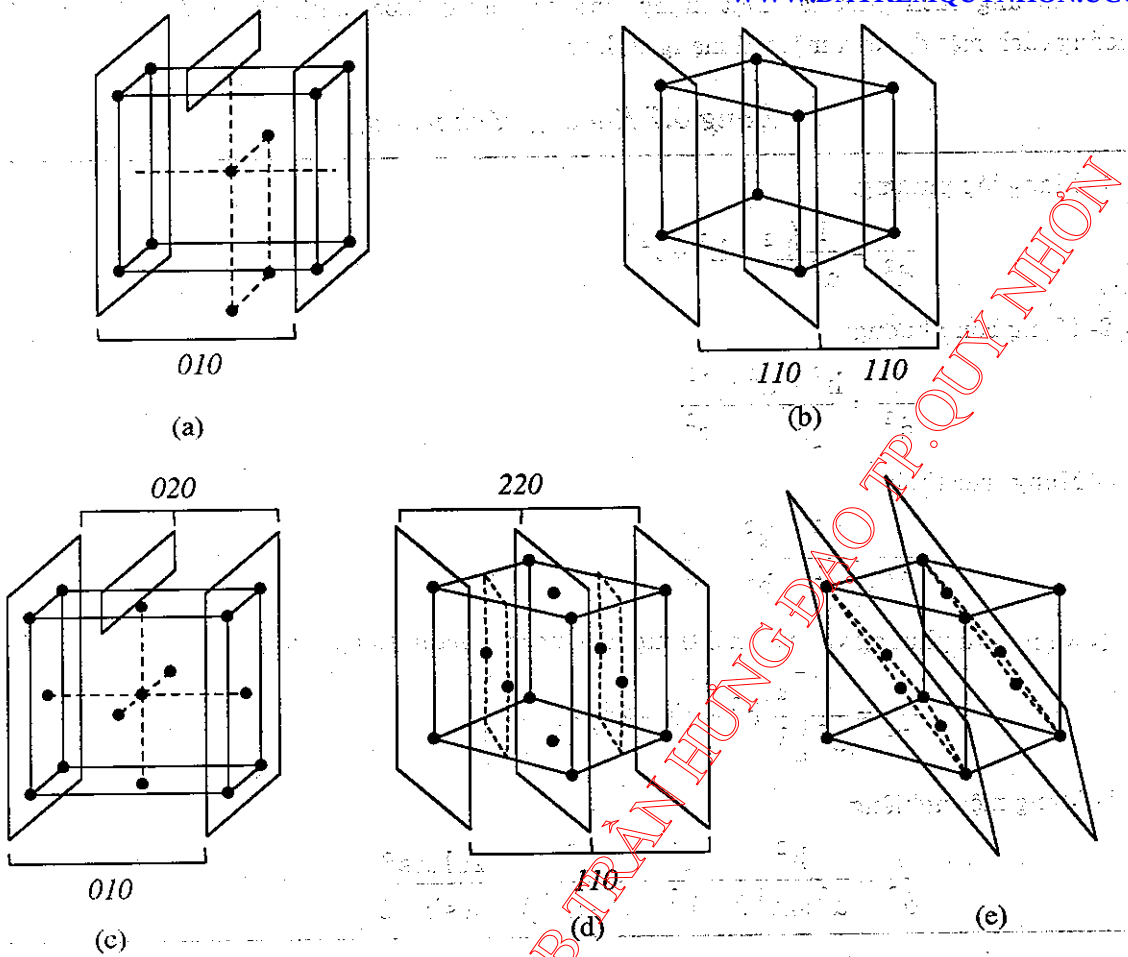
***Hình 6.25** Chỉ số Miller của mặt tinh thể*

(Mặt PQR có chỉ số hkl=111).

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 10000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM



Hình 6.26 *Chỉ số Miller của mặt mạng tinh thể lập phương.*
(a,b) mạng tâm khối lập phương; (c-e) mạng tâm mặt lập phương

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 100B TRẦN HƯNG ĐẠO TP.QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

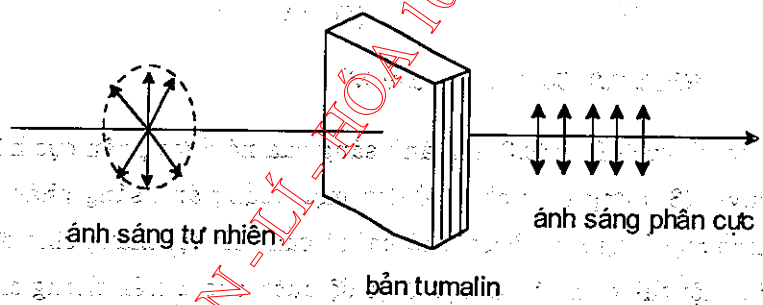
Chương 7

CÁC PHƯƠNG PHÁP KHÁC

7.1. Phương pháp đo độ quay cực

7.1.1. Ánh sáng phân cực thẳng

Ánh sáng tự nhiên đi qua một môi trường bất đẳng hướng, thí dụ các tinh thể, thì trong những điều kiện nhất định nào đó, do tác dụng của môi trường làm cho cường độ điện trường chỉ còn dao động theo một phương nhất định. Ánh sáng có vectơ cường độ điện trường $\vec{E}$ chỉ dao động theo một phương nhất định được gọi là ánh sáng phân cực thẳng hay ánh sáng phân cực toàn phần. Mặt phẳng chứa tia sáng và phương dao động của vectơ điện trường được gọi là mặt phẳng dao động, còn mặt phẳng chứa tia sáng và vuông góc với mặt phẳng dao động gọi là mặt phẳng phân cực. Ánh sáng phân cực xuất hiện trong các quá trình vật lí như khúc xạ, tán xạ hay phản xạ và có thể tạo ra khi cho ánh sáng tự nhiên đi qua một bản tinh thể như tumalin (hợp chất alumin silicoborat).



Hình 7.1 Sơ đồ tạo ánh sáng phân cực.

7.1.2. Độ quay cực

Khi cho ánh sáng phân cực thẳng đi qua dung dịch một chất quang hoạt thì mặt phẳng phân cực sẽ bị quay một góc α. Tuỳ theo chất quang hoạt mà góc quay này có thể sang phải (+) hay sang trái (-). Độ lớn của góc quay α phụ thuộc vào nồng độ C (g/100 ml dung dịch), chiều dày lớp dung dịch l (dung môi), nhiệt độ t và chiều dài sóng λ:

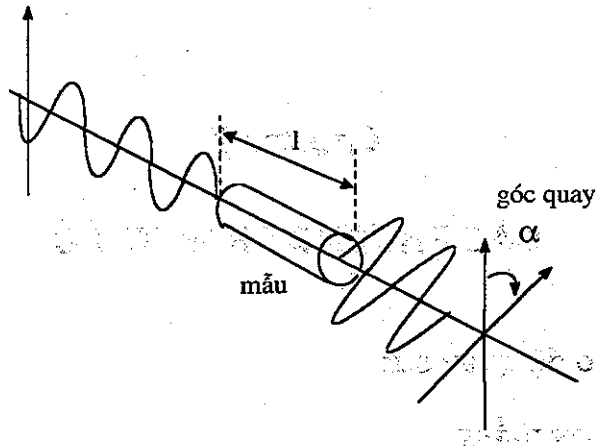
$$\alpha = [\alpha]_t^{\lambda} \frac{C.l}{100} \qquad (7.1)$$

α được gọi là độ quay cực, $[\alpha]_t^{\lambda}$ gọi là độ quay cực riêng.

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000 BTRUNG HỌC ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

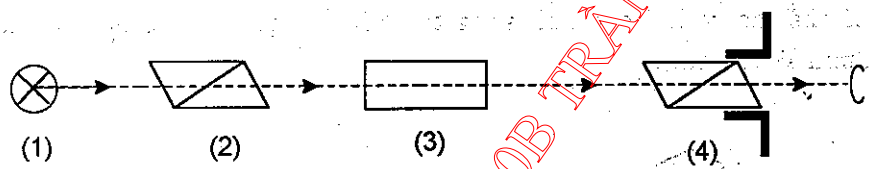
WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM



Hình 7.2 Sơ đồ quay mặt phẳng phân cực khi chiếu ánh sáng phân cực thẳng qua dung dịch chất quang hoạt.

7.1.3. Phương pháp đo góc quay cực

Để đo độ quay cực ta sử dụng phân cực kế. Hình 7.3 chỉ ra sơ đồ của một phân cực kế, gồm nguồn sáng (1), máy phân cực ánh sáng (lăng kính Nicol) (2), cuvet (3), lăng kính Nicol (4).



Hình 7.3 Sơ đồ phân cực kế.

Nguồn sáng dùng đèn natri, vạch D (589,3 nm, ánh sáng của nó được phân cực hoá nhờ lăng kính Nicol, rồi đi qua cuvet (3) đựng mẫu chất., ở đây mặt phẳng ánh sáng phân cực bị quay và được điều chỉnh lại nhờ một lăng kính Nicol thứ hai có gắn với một thang chia độ. Khi xoay lăng kính Nicol này, nhờ một thị kính có thể đọc được độ quay cực α trên thang chia độ. Để kiểm tra điểm 0 của máy thực hiện phép đo không có mẫu chất. Do sự tương tác của dung môi khá mạnh nên kết quả đo cần ghi rõ trong dung môi nào.

Ví dụ: $[\alpha]_t^{\lambda}$ của vitamin D bằng +102,5° (trong etanol), bằng +82° (trong axeton) và bằng +52° (trong clorofom). Bảng 7.1 chỉ ra độ quay cực riêng $[\alpha]_t^{\lambda}$ của một số chất trong các dung môi khác nhau.

Ứng dụng của phương pháp đo độ quay cực để phân tích cấu tạo các hợp chất có tính quang hoạt và phân tích định lượng chúng, ví dụ dụng cụ đường kế dùng để xác định tỉ lệ phần trăm đường nguyên chất.

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

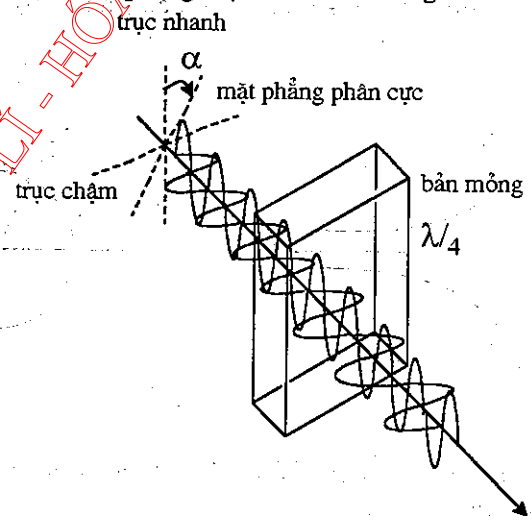
Bảng 7.1 Độ quay cực riêng của một số hợp chất quang hoạt.

Hợp chất	Dung môi	$[\alpha]_t^\lambda$ (°)
Axit β-lactic (axit D-lactic)	nước	-2,3
S-Alanin (L-alanin)	nước	+2,7
S-Lơxin (L-lơxin)	HCl 6M	+15,1
	nước	-10,8
	NaOH 3M	+7,6
α-D-Glucozơ	nước	+112,2
β-D-Glucozơ	nước	+17,5
D-Glucozơ (hỗn hợp)	nước	+52,7
Đường thô	nước	+66,4
Cholesterin	ete	-31,5
Viatmin D_2	etanol	+102,5
	axeton	+82,6
	clorofom	+52,0
(+)-Hexahelic		+37,7

7.2. Phổ tán sắc quay và phổ lưỡng hướng sắc tròn

7.2.1. Ánh sáng phân cực tròn

Khi cho ánh sáng phân cực thẳng đi qua một bản mỏng λ/4 sẽ tạo ra ánh sáng phân cực tròn. Bản mỏng λ/4 được chế tạo từ chất lưỡng chiết, nó gồm các lớp mỏng xếp song song với quang trục. Khi ánh sáng phân cực thẳng đi qua bản mỏng λ/4 thì mặt phẳng phân cực của nó sẽ tạo ra một góc 45° hay 315° đối với quang trục của bản mỏng λ/4.



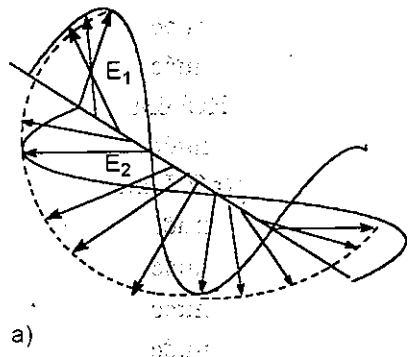
Hình 7.4 Sơ đồ biến ánh sáng phân cực thẳng thành ánh sáng phân cực tròn nhờ bản mỏng λ/4.

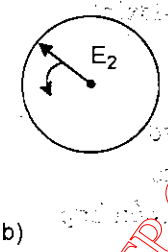
DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 00B TRẦN HƯNG ĐẠO TP.QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Tại đây ánh sáng phân cực thẳng bị phân tách thành hai hợp phần: tia thường và tia bất thường. Hai sóng này lệch pha nhau một góc 90° hay λ/4 khi đi ra khỏi tấm mỏng và nếu chúng chồng chất nhau sẽ tạo ra ánh sáng phân cực tròn *(hình 7.4 và 7.5)*.





Hình 7.5 *Sự chồng chất của hai sóng phân cực thẳng cho ánh sáng phân cực tròn.*

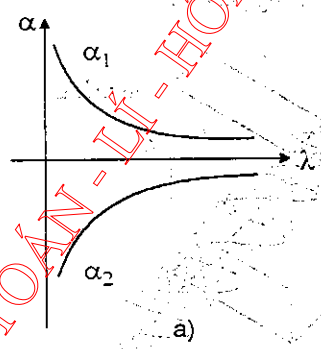
Chùm ánh sáng xuất hiện từ bức xạ có mặt phẳng phân cực quay 45° bị phân cực tròn bên phải, còn chùm ánh sáng tương ứng với bức xạ phân cực quay 315° bị phân cực tròn bên trái. Khi hai sóng phân cực tròn bên phải và bên trái chồng chất nhau sẽ xuất hiện trở lại ánh sáng phân cực thẳng. Hai sóng phân cực tròn có biên độ khác nhau, nếu chồng chất nhau sẽ tạo ra ánh sáng phân cực elip.

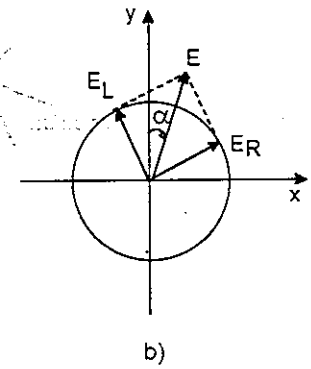
7.2.2. Phổ tán sắc quay và phổ lưỡng hướng sắc tròn

Phổ tán sắc quay quang học, kí hiệu là ORD (viết tắt của từ Optical Rotary Dispersion) và phổ lưỡng hướng sắc tròn, viết tắt là CD (Circular Dichroism) được ứng dụng để nghiên cứu cấu tạo của các đồng phân quang học rất có hiệu quả.

7.2.2.1. Phổ tán sắc quay (ORD)

Cơ sở lí thuyết của phương pháp ORD dựa trên nguyên tắc là trong môi trường chất quang hoạt, tốc độ truyền sóng c và hệ số hấp thụ ε của hai sóng phân cực tròn quay phải và quay trái khác nhau.





Hình 7.6 *a) Đường cong phổ ORD chuẩn (α_1 dương của hợp chất quay phải, α_2 âm của hợp chất quay trái).*

b) Trong môi trường chất quang hoạt vectơ điện trường E của ánh sáng phân cực thẳng được tạo ra từ hai sóng quay phải và quay trái có điện trường E_R và E_L đã quay một góc α so với trục ánh sáng phân cực thẳng ban đầu.

Trường hợp tốc độ truyền sóng của sóng phân cực tròn quay phải (c_r) và quay trái (c_l)

ĐỀU ĐÁN TOÁN - LÍ - HÓA 10000 TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

khác nhau ($c_l \neq c_r$) sẽ dẫn đến sự lệch pha của cả hai bức xạ ánh sáng, do đó làm quay vectơ điện trường $\vec{E}$ của ánh sáng phân cực thẳng, mà nó xuất hiện trở lại do sự chồng chất của hai sóng phân cực tròn *(xem hình 7.6a)*. Độ lớn của góc quay α này giảm khi chiều dài bước sóng tăng:

$$\alpha = \frac{180(n_l - n_r).l}{l_0} \qquad (7.2)$$

ở đây góc quay α tính bằng độ, chiều dày l và chiều dài sóng tính bằng đơn vị chiều dài, n_l và n_r là chỉ số khúc xạ đối với tia sáng quay trái và quay phải. Phổ tán sắc quay quang học chuẩn α(λ) được chỉ ra ở hình 7.6.

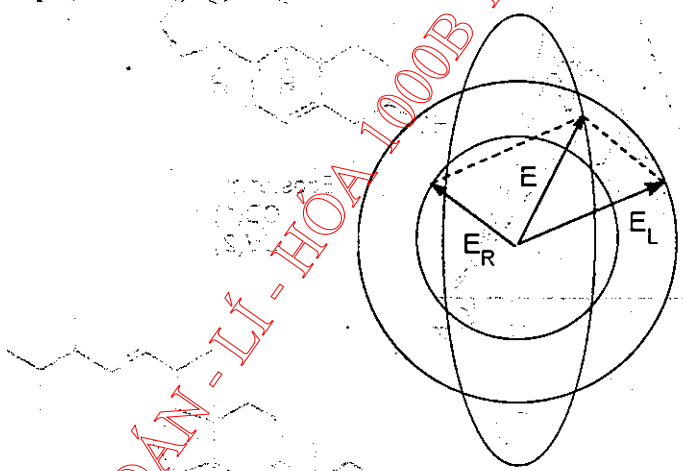
7.2.2.2. Phổ lưỡng hướng sắc tròn

Phổ lưỡng hướng sắc tròn là một dạng của phổ hấp thụ trong vùng UV/VIS. Đó là sự hấp thụ khác nhau của ánh sáng phân cực tròn bên phải và bên trái khi đi qua mẫu. Phổ lưỡng hướng sắc tròn được mô tả qua sự phụ thuộc của hiệu số độ hấp thụ mol giữa ánh sáng phân cực tròn quay phải và quay trái vào chiều dài sóng:

$$\Delta A = A_r - A_l$$

ở đây ΔA là hiệu số độ hấp thụ, A_r và A_l là độ hấp thụ mol của ánh sáng phân cực tròn quay phải và quay trái tương ứng.

Trong môi trường chất quang hoạt, vectơ điện trường của ánh sáng phân cực tròn quay phải (E_r)và quay trái (E_l) có độ lớn khác nhau, do đó sự chồng chất hai sóng này cho ánh sáng phân cực elip. Hình chiếu của sự chuyển động của vectơ trường dọc theo hướng mở rộng cho một hình elip. *(hình 7.7)*.



***Hình 7.7** Hướng chuyển động hình elip của vectơ điện trường của ánh sáng phân cực tròn.*

Vì vậy để mô tả độ hấp thụ trong trường hợp này, người ta hay dùng một đại lượng khác gọi là độ elip Φ:

$$\Phi = k.1000.\Delta A$$ k là một hằng số bằng 32,980.

Vì độ elip phụ thuộc vào nồng độ dung dịch và chiều dày lớp dung dịch, nên còn có đại lượng đặc trưng là độ elip mol [Φ]:

$$[\Phi] = \frac{\Phi}{10.c.l} \qquad (7.3)$$

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

trong đó c là nồng độ dung dịch, l là chiều dày lớp dung dịch, thứ nguyên của [Φ] là $(\text{độ.cm}^2.\text{dmol}^{-1})^2$.

Độ elip mol cũng liên hệ với hệ số hấp thụ mol Δε qua biểu thức:

$$[\Phi]=3298.\Delta\varepsilon \qquad (7.4)$$

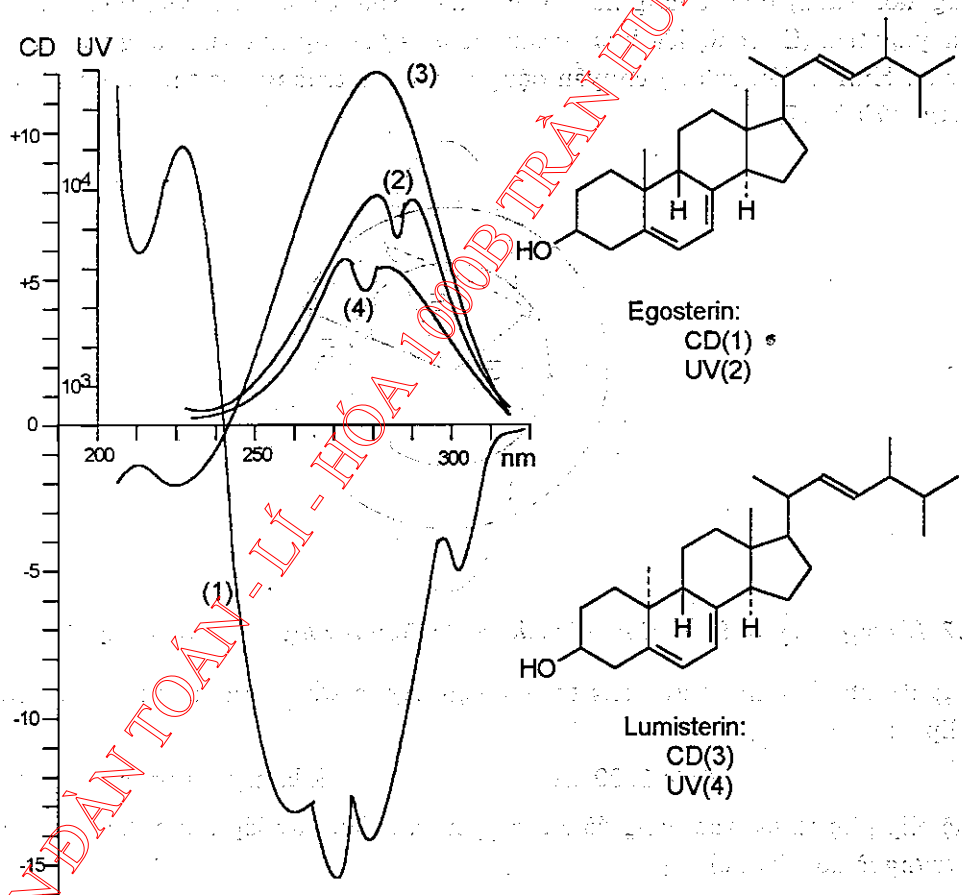
ở đây Δε là hiệu số hệ số hấp thụ mol của chất nghiên cứu đối với ánh sáng phân cực tròn quay phải và quay trái:

$$\Delta\varepsilon=\varepsilon_r-\varepsilon_l \qquad [\text{l.mol}^{-1}.\text{cm}^{-1}] \qquad (7.5)$$

ε_r là hệ số hấp thụ mol đối với ánh sáng phân cực tròn quay phải và ε_l là hệ số hấp thụ mol đối với ánh sáng phân cực tròn quay trái.

Trên phổ lưỡng hướng sắc tròn, giá trị Δε ($\text{l.mol}^{-1}.\text{cm}^{-1}$) có cả giá trị âm và dương ứng với cực đại và cực tiểu của đường cong phổ.

Hình 7.8 chỉ ra phổ lưỡng hướng sắc tròn và phổ tử ngoại của egosterin và lumisterin. Trên phổ lưỡng hướng sắc tròn của egosterin có một cực đại ở 220 nm và bốn cực tiểu ở 260, 270, 280 và 300 nm, còn trên phổ tử ngoại của nó chỉ có hai đỉnh cực đại ở 280 và 290 nm. Trên phổ lưỡng hướng sắc tròn của lumisterin có một cực đại ở 280 nm và một cực tiểu ở 220 nm, còn trên phổ tử ngoại của nó cũng có hai cực đại ở 270 và 280 nm.



Hình 7.8 Phổ lưỡng hướng sắc tròn và tử ngoại của egosterin và lumisterin.

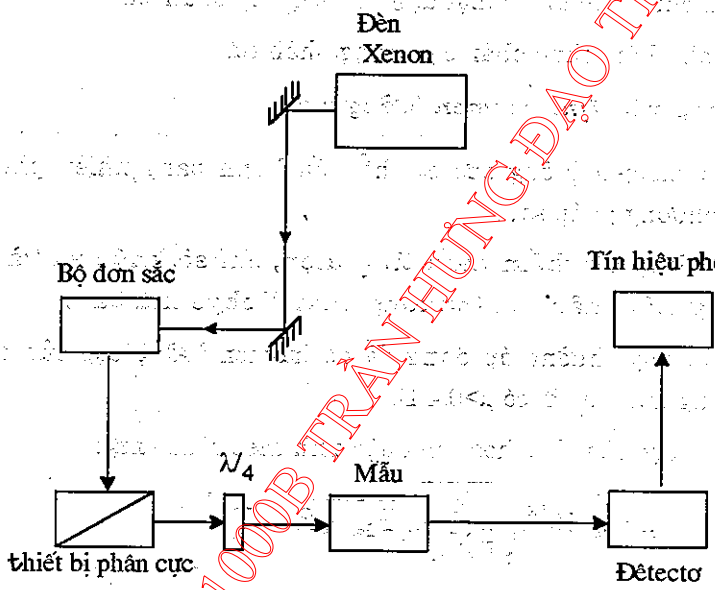
DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 10000B TRẦN HƯNG ĐẠO QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Nguyên lí cấu tạo của phổ kế lưỡng hướng sắc tròn

Phổ kế lưỡng hướng sắc tròn có cấu tạo như một phổ kế quang học thông thường, gồm có các bộ phận chính sau: nguồn sáng, bộ đơn sắc và đêtectơ, ngoài ra có thêm bộ phận thiết bị phân cực để tạo ra ánh sáng phân cực thẳng làm nguồn sinh ra ánh sáng phân cực tròn. Hình 7.9 chỉ ra sơ đồ phổ kế lưỡng hướng sắc tròn. Đo phổ kế lưỡng hướng sắc vòng đòi hỏi kĩ thuật cao hơn phổ kế tử ngoại thông thường vì độ hấp thụ ở phổ lưỡng hướng sắc tròn rất nhỏ, nếu một mẫu có độ hấp thụ ở phổ tử ngoại là 1,0 đơn vị thì độ hấp thụ ΔA ở phổ lưỡng hướng sắc tròn chỉ là 10^{-4} đến 10^{-6} đơn vị.



Hình 7.9 Sơ đồ phổ kế lưỡng hướng sắc tròn.

7.3. Momen lưỡng cực

7.3.1. Khái niệm cơ bản

Trong một phân tử nếu trọng tâm điện tích âm và dương không trùng nhau sẽ dẫn đến sự xuất hiện momen lưỡng cực μ, độ lớn của nó bằng tích của điện tích q và độ dài lưỡng cực l:

$$\mu = q.l \qquad (7.6)$$

Đơn vị đo của momen lưỡng cực là debai (D).

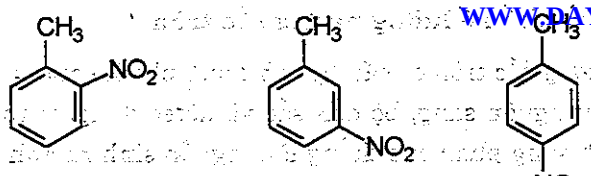
$$1\ D = 10^{-18}\ cm^{3/2}.g^{1/2}.sec^{-1}$$

Momen lưỡng cực là một đại lượng vectơ có hướng từ cực dương sang cực âm. Momen lưỡng cực liên quan chặt chẽ với cấu trúc phân tử, độ lớn của nó phụ thuộc vào bản chất của các nhóm thế và vào cả vị trí tương hỗ của chúng trong phân tử, do đó nó được sử dụng để xác định cấu trúc phân tử. Ví dụ, momen lưỡng cực của các đồng phân *ortho-*, *meta-* và *para-* nitrotoluen có giá trị khác nhau:

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM



μ=3,79 D μ=4,29 D μ=4,52 D

Phương pháp momen lưỡng cực có thể sử dụng để:

- Xác định vị trí không gian của các nhóm thế phân cực.
- Nghiên cứu sự phân bố mật độ electron trong phân tử.
- Xác định nhóm chức phân cực trong phân tử.

7.3.2. Phương pháp xác định momen lưỡng cực

Để xác định momen lưỡng cực có thể tiến hành bằng nhiều phương pháp, trong đó thường dùng hai phương pháp sau:

1- Phương pháp đo thẩm thấu tĩnh điện, chỉ số khúc xạ và mật độ dung dịch loãng trong dung môi phân cực (phương pháp Debye thứ hai)

Phương pháp này thường áp dụng để đo momen lưỡng cực của các chất lỏng và rắn không liên kết trong dung dịch, có μ>0,4 D.

Momen lưỡng cực của chất hoà tan được tính theo công thức:

$$\mu = \frac{3}{2}.10^{18}.\sqrt{\frac{k}{\pi.N_A}}.\sqrt{P_{2\infty} - R_{D^2}}.T \qquad (7.7)$$

ở đây k là hằng số Boltzmann, N_A là số Avogadro, $P_{2\infty}$ là độ phân cực của chất hoà tan trong dung dịch loãng vô cùng, R_{D^2} là độ khúc xạ ánh sáng natri vàng, còn T là nhiệt độ tuyệt đối. Việc xác định các thông số $P_{2\infty}$ và R_{D^2} về mặt thực nghiệm khá phức tạp, tiến hành mất nhiều thời gian.

2- Xác định momen lưỡng cực theo phương pháp vectơ

Phương pháp này dựa trên cơ sở là vectơ momen lưỡng cực phân tử bằng tổng vectơ momen lưỡng cực của các liên kết trong phân tử:

$$\vec{\mu} = \sum_{i=1}^{n} \vec{\mu}_i \qquad (7.8)$$

Thông qua hình chiếu của vectơ momen lưỡng cực m_x, m_y và m_z trên 3 trục toạ độ x, y và z ta có:

$$\mu = \left[(\sum_{i=1}^{n} m_x)^2 + (\sum_{i=1}^{n} m_y)^2 + (\sum_{i=1}^{n} m_z)^2 \right]^{1/2} \qquad (7.9)$$

hoặc tính μ theo cặp liên kết các cực:

$$\mu = (\mu_1^2 + \mu_2^2 + 2\mu_1\mu_2 \cos\theta_{12})^{1/2} \qquad (7.10)$$

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 10 CB TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

ở đây μ_1, μ_2 là momen liên kết cực, θ_{12} là góc giữa các vectơ momen này.

Trong bảng 7.2 chỉ ra momen lưỡng cực của các liên kết C-X và H-X. Ở các hợp chất no và thơm, do sự lai hoá các liên kết mà momen lưỡng cực của các liên kết C-X không trùng với các giá trị trong bảng. Vì thế để tính momen lưỡng cực của các hợp chất nói trên cần phải tính tổ hợp các momen lưỡng cực có tính đến góc nghiêng vectơ (φ).

***Bảng 7.2** Momen lưỡng cực của liên kết **

Liên kết	μ_{C-X}	Liên kết	μ_{C-X}
C-F	1,39	C=N	1,4
C-Cl	1,47	C=O	2,4
C-Br	1,42	C ≡N	3,1
C-I	1,25	H-C	0,4
C-N	0,45	N-H	1,31
C-O	0,7	H-O	1,51

** Bảng này thuận tiện chỉ đối với việc tính momen lưỡng cực của các dẫn xuất dãy no.*

** Nguyên tử ở phía bên trái liên kết là đầu dương của lưỡng cực.*

Ví dụ:

Tính momen lưỡng cực của phân tử 5-clo-2-brom-1-triflometylbenzen. Biết giá trị momen của các nhóm C-Cl(1,59 D), C-Br (1,57 D) và C-F(2,54 D).

Cách tính:

(1) Tính theo phương pháp hình chiếu vectơ momen của nhóm phân cực. Trên hình 7.10 đã chỉ ra sơ đồ cấu tạo của hợp chất và hệ toạ độ, chọn liên kết C-CF_3 hướng song song với trục x có thể áp dụng công thức tính:

$$\mu = \left[(\mu_1 + \mu_2 \cos\theta_{2x} + \mu_3 \cos\theta_{3x})^2 + (\mu_2 \sin\theta_{2x} + \mu_3 \sin\theta_{3x})^2\right]^{1/2} \qquad (7.11)$$

ở đây θ_{2x} và θ_{3x} là góc giữa các vectơ liên kết C-Br và C-Cl theo trục x tương ứng bằng 60° và 120°. Thay các giá trị momen của các liên kết vào công thức này ta có:

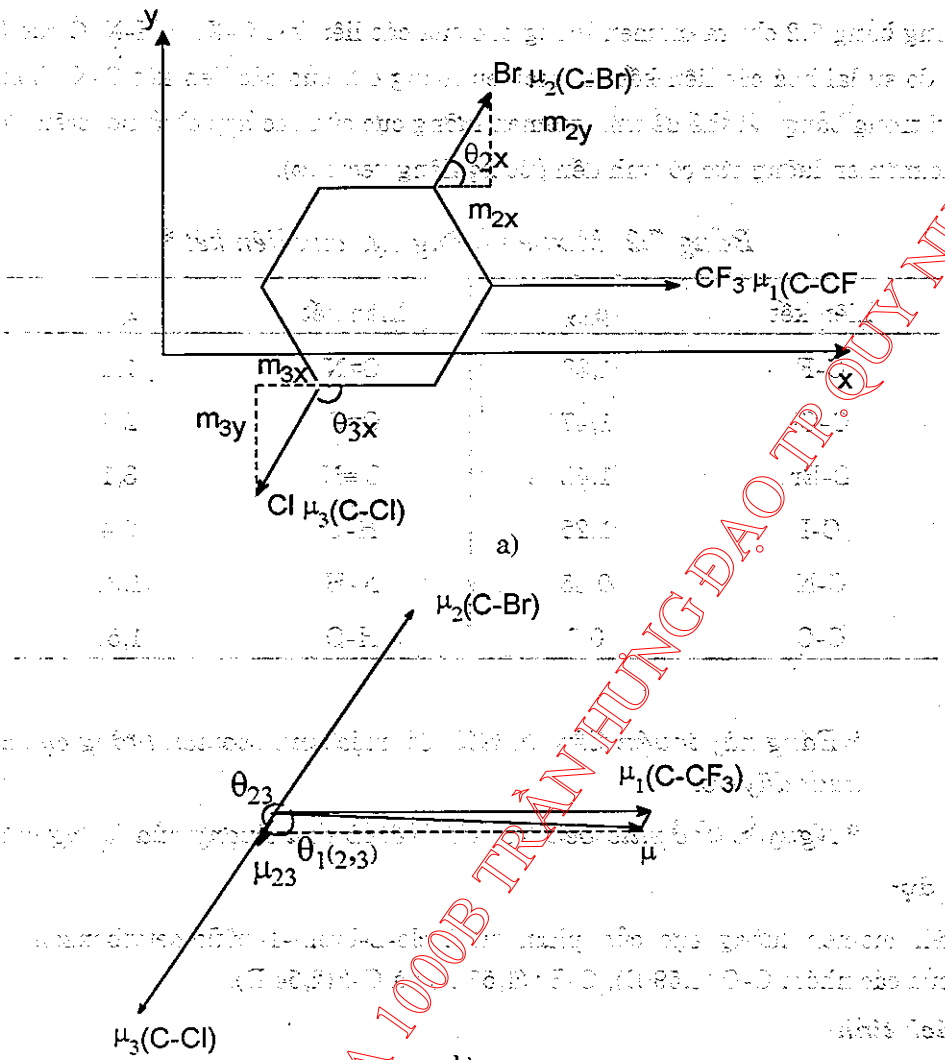
$\mu=[(2,54+1,57.0,5+1,59.0,5)^2+(1,57.0,866-1,59.0,866)^2]^{1/2}$=***2,53 D***

Thực nghiệm đo được μ=***2,52 D***.

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP.QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM



***Hình 7.10** Tính momen lưỡng cực của phân tử 5-clo-2-brom-1-triflometyl-benzen theo các vectơ: a) Tổng hình chiếu; b) Cộng cặp momen.*

(2) Tính theo phương pháp cộng cặp vectơ momen:

$$\mu = \left(\mu_1^2 + \mu_{2,3}^2 + 2\mu_1\mu_{2,3}\cos\theta_{1\ (2,3)}\right)^{1/2} \qquad (7.12)$$

trong đó

$$\mu_{2,3} = \left(\mu_2^2 + \mu_3^2 + 2\mu_2\mu_3\cos\theta_{2,3}\right)^{1/2} \qquad (7.13)$$

ở đây $\theta_{1(2,3)}$ và $\theta_{2,3}$ là góc giữa các vectơ tương ứng và bằng 120° và 180°. Thay giá trị vào ta có:

μ=[2,54^2+1,57^2+1,59^2+2.1,57.1,59.cos(180°)+2.2,54.(1,57^2+1,59^2+ 2.1,57.1,59cos(180°).cos(120°)]$^{1/2}$=***2,53 D***

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN
https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

***Bảng 7.3** Momen lưỡng cực nhóm C-X (Debai) *.*

X	$\mu(C_6H_5\text{-}X)$	φ°	$\mu(CH_3\text{-}X)$	φ°
CH_3	-0,37	0	0	0
CF_3	2,54	180	2,32	180
CCl_3	2,04	180	1,57	180
CN	4,05	180	3,57	180
CHO	2,96	146	2,49	125
$COCH_3$	2,96	132	2,75	120
$COOCH_3$	1,83	110	1,75	130
F	1,47	180	1,79	180
Cl	1,59	180	1,87	180
Br	1,57	180	1,82	180
I	1,40	180	1,65	180
OH	-1,55	90	-1,70	118
OCH_3	-1,28	72	-1,28	124
$OCOCH_3$	-1,69	66		
NH_2	-1,53	49	-1,46	91
$N(CH_3)_2$	-1,58	30	-0,86	109
NO	3,09	149		
NO_2	4,01	180	3,10	180

**Dấu dương được viết cho nhóm X là đầu âm của lưỡng cực R-X, góc φ ứng với góc giữa liên kết C-X và hướng vectơ momen của nhóm X. Khi tính momen lưỡng cực phân tử theo sơ đồ cộng không đồng thời sử dụng giá trị của momen nhóm và liên kết, bởi vì đại lượng momen nhóm trong phân tử CH_3-X khác biệt với momen liên kết C-X. Khi φ=0°, hiệu số này bằng momen liên kết C_{sp3}-H (0,4 D). Momen nhóm $\mu(C_6H_5X)$ thuận lợi để tính momen lưỡng cực của dẫn xuất etilen.*

Cần chú ý các trường hợp sau:

a) Nếu trong phân tử có hai nhóm tự do nằm trên cùng một trục có momen ngược chiều nhau (ví dụ hai nhóm thế giống nhau ở vị trí *para* của vòng benzen) thì momen lưỡng cực μ được tính theo công thức:

$$\mu = \left[\mu_1^2 + \mu_2^2 + 2\mu_1\mu_2(-1)\cos^2\varphi\right]^{1/2} = \sqrt{2.\mu^2\sin^2\varphi} \qquad (7.14)$$

vì ở đây $\mu_1=\mu_2=\mu$, $\varphi_1=\varphi_2$, $\theta_{12}=180°$ và $\cos\theta_{12}=-1$.

Ví dụ:

Tính momen lưỡng cực của *p*-diaminobenzen có μ_{NH_2}=-1,58 D và φ=49°.

Áp dụng công thức trên ta có:

$$\mu = \sqrt{2.\mu^2\sin^2\varphi} = \sqrt{2.(-1{,}58)^2\sin^2 49°} = \sqrt{2.(-1{,}58)^2.(0{,}7547)^2} = 1{,}68D$$

Thực nghiệm đo được μ=***1,50 D*** (ở 40°C).

b) Nếu trong phân tử có chứa hai nhóm quay tự do thì

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÝ - HÓA, GV TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

$$\mu = \left[\mu_1^2 + \mu_2^2 + 2\mu_1\mu_2 \cos\varphi_1 \cos\varphi_2 \cos\theta_{12}\right]^{1/2} \quad (7.15)$$

ở đây μ_i là momen nhóm, φ_i là góc nghiêng momen đối với trục quay, θ_{12} là góc giữa các trục quay.

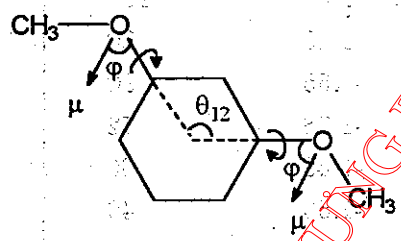
Ví dụ:

Tính momen lưỡng cực của *m*-dimetoxibenzen có nhóm metoxi quay tự do, θ_{12}=120° (*xem hình 7.11).*

Theo bảng 7.3 thì μ=-1,28 D, φ=72°, cos72°=0,309 và cos120°=-0,5; do đó:

$\mu=[(-1,28)^2+(-1,28)^2+2.(-1,28).0,309.0,309.(-0,5)]^{1/2}$=***1,77 D***

Thực nghiệm đo được μ=***1,58 D.***



Hình 7.11 *Sơ đồ tính momen lưỡng cực của m-dimetoxibenzen.*

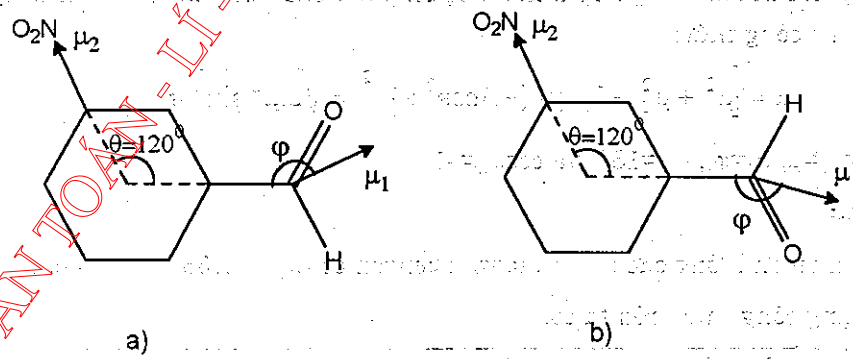
c) Nếu chất cần tính tồn tại dưới dạng hỗn hợp các dạng hợp chất khác nhau (monome, đime, tautome, đồng đẳng,...) thì momen lưỡng cực của chúng được tính theo công thức:

$$\mu_{hỗnhợp} = \sqrt{\sum_{i=1}^{n} \chi_i \mu_i^2} \quad (7.16)$$

ở đây χ_i là nồng độ mỗi hợp phần, μ_i là momen lưỡng cực của mỗi công thức.

Ví dụ:

Hãy xác định tỉ lệ giữa các cấu hình s-*cis* và s-*trans* của *p*-nitrobenzandehit từ các giá trị momen lưỡng cực (μ=3,28 D) và momen nhóm CHO và NO_2 trong bảng 7.3.



Hình 7.12 *p-Nitrobenzandehit (a) s-cis và (b)s-trans.*

Ta có thể tính momen lưỡng cực của các dạng đồng phân lập thể của *m*-nitrobenzandehit theo công thức trên. Góc giữa các vectơ μ_1 và μ_2 trong dạng s-*cis* bằng:

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON
DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 100% TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

θ_{12}=120°-(180°-146°)=86°

trong dạng s-*trans* bằng:

θ_{12}=120°+(180°-146°)=154°

Giả thiết μ_1=2,96 D và μ_2=4,01 D, ta có:

$$\mu_{s-cis} = \sqrt{2,96^2 + 4,01^2 + 2x2,96x4,01x0,698} = 5,15D$$

$$\mu_{s-trans} = \sqrt{2,96^2 + 4,01^2 + 2x2,96x4,01x0,8988} = 1,87D$$

Theo công thức:

$$\mu_{hh} = \sqrt{\frac{\chi_{s-cis} \cdot \chi^2_{s-cis}}{100} + \frac{\chi_{s-trans} \cdot \chi^2_{s-trans}}{100}} \quad (7.17)$$

Từ công thức trên ta rút ra:

$$\chi_{s-trans} = 100.\frac{\mu^2_{s-cis} - \mu^2_{hh}}{\mu^2_{s-cis} - \mu^2_{s-trans}} = 100.\frac{5,15^2 - 3,28^2}{5,15^2 - 1,87^2} = 68\%$$

$\chi_{s-trans}$=68%.

χ_{s-cis}=(100-68)%=32%.

Bảng 7.4 *Momen lưỡng cực của một số hợp chất hữu cơ.*

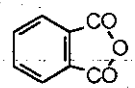
số T.T.	Công thức	Hợp chất	Phương pháp đo	Nhiệt độ (°K)	Momen lưỡng cực, μ (D)
1	CH_2=CH=CH_2	alen	khí	298-368	0,20
2	CH_3-C≡CH	alilen	khí	298-348	0.77
3	CH_3-CH=CH_2	propen	khí	246-476	0.35
4	CH_3OH	metanol	khí	308-482	1.69
5	C_2H_5OH	etanol	khí	308-483	1.67
6	*n*-C_3H_7OH	*n*-propanol	khí	376-205	1.657
7	*iso*-C_3H_7OH	*iso*-propanol	khí	300-463	1.682
8	$C_6H_{11}OH$	xiclohexanol	B	18°C	1.69
9	$C_2H_5OC_2H_5$	dietylete	khí	288-476	1.17
10	$C_6H_5OC_6H_5$	diphenylete	khí	445-483	1.14
11	$C_6H_5OCH_3$	anisol	khí	403	1.35
12	CH_3F	metyl florua	khí	224-498	1.808
13	CH_3Cl	metyl clorua	khí	298-418	1.86
14	CH_3Br	metyl bromua	khí	306-406	1.78

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org

Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

số T.T.	Công thức	Hợp chất	Phương pháp đo	Nhiệt độ (°K)	Momen lưỡng cực, μ (D)
15	CH_3I	metyl iodua	khí	295-337	1.64
16	$CHCl_3$	clorofom	khí	298	1.06
17	CCl_4	cacbon tetraclorua	khí		0
18	$HCOOH$	axit focmic	khí	345-423	1.51
19	CH_3COOH	axit axetic	khí	298-494	1.73
20	$ClCH_2COOH$	axit monocloaxetic	B	30°C	2.29
21	C_6H_5COOH	axit benzoic	B	30°C	1.64
22	$HCOOC_2H_5$	etyl focmiat	khí	292-435	1.92
23	$CH_3COOC_2H_5$	etyl axetat	khí	302-467	1.76
24	$HONH_2$	focmamit	khí	425-449	3.20
25	CH_3CONH_2	axetamit	D	30°C	3.72
26	$CH_3CON(CH_3)_2$	dimetylaxetamit	D	30°C	3.79
27	CH_3COCl	axetyl clorua	khí	320-483	2.67
28	CH_3COBr	axetyl bromua	B	20°C	2.43
29	$ClCH_2COCl$	cloaxetyl clorua	khí	358-529	2.20
30	$(CH_3CO)_2O$	anhidrit axetic	khí	320-540	2.7-2.9
31	$(C_6H_5CO)_2O$	anhidrit benzoic	B	25°C	4.15
32		anhidrit phtalic	B	20°C	5.25
33	$HCH=O$	focmandehit	khí	420-520	2.27
34	CH_3CHO	axetandehit	khí	420-469	2.72
35	$CH_2=CH-CHO$	acrolein	khí	377-478	3.04
36	CH_3COCH_3	axeton	khí	301-455	2.85
37	$CH_3COC_2H_5$	metyletylxeton	B	22°C	1.82
38	CH_3COCH_2Cl	cloaxeton	khí	336-454	2.20
39	CH_3NH_2	metylamin	khí	298	1.28
40	$(CH_3)_2NH$	dimetylamin	khí	298	1.02
41	$(CH_3)_3N$	trimetylamin	khí	289-418	0.65
42	$H_2NCH_2CH_2NH_2$	etilendiamin	khí	355-429	1.94
43	$HOCH_2CH_2NH_2$	etanolamin	D	25°C	2.27
44	HCN	hidroxinua	khí	301-470	2.93
45	$ClCN$	xianoclorua	MW		2.80
46	CH_3CN	axetonitrin	khí	354-463	3.94
47	$CH_2(CN)_2$	malodinitrin	B	25°C	3.56
48	CH_3NO_2	nitrometan	khí	337-454	3.54
49	CCl_3NO_2	clopicrin	khí	303-425	1.18

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

(Bảng 7.4 - tiếp theo)

số T.T.	Công thức	Hợp chất	Phương pháp đo	Nhiệt độ (°K)	Momen lưỡng cực, μ (D)
50	CS_2	cacbon disunfua	khí	322-414	0
51	$(NH_2)_2CS$	thioure	D	298	4.89
52	C_2H_5SH	etylmecaptan	khí	308-478	1.56
53	CH_3SCH_3	metylsunfua	B	293	1.40
54	$(CH_3)_2SO$	metylsunfon	khí	424-526	4.41
55	C_6H_6	benzen	khí	326-480	0
56	$C_6H_5CH_3$	toluen	khí	357-482	0.37
57	$1,2\text{-}(CH_3)_2C_6H_4$	*o*-xilen	hơi		0.62
58	$1,3\text{-}(CH_3)_2C_6H_4$	*m*-xilen	B	293	0.37
59	$1,4\text{-}(CH_3)_2C_6H_4$	*p*-xilen	B	293	0.10
60	$C_6H_5CH{=}CH_2$	stiren	khí	442-462	<0.20
61	$C_6H_5NO_2$	nitrobenzen	khí	442-549	4.19
62	$1,2\text{-}(NO_2)_2C_6H_4$	*o*-dinitrobenzen	B	293	5.98
63	$1,3\text{-}(NO_2)_2C_6H_4$	*m*-dinitrobenzen	B	298	3.96
64	$1,4\text{-}(NO_2)_2C_6H_4$	*p*-dinitrobenzen	B	293	0.58
65	$1,2\text{-}CH_3C_6H_4NO_2$	*o*-nitrotoluen	B	303	3.79
66	$1,3\text{-}CH_3C_6H_4NO_2$	*m*-nitrotoluen	B	303	4.29
67	$1,4\text{-}CH_3C_6H_4NO_2$	*p*-nitrotoluen	B	303	4.53
68	C_6H_5NO	nitrozobenzen	B	298	3.14
69	$C_6H_5SO_3H$	axit benzensunfonic	B		3.77
70	$C_6H_5SO_2Cl$	benzensunfonyl clorua	B	298	4.53
71	$C_6H_5SO_2NH_2$	benzensunfonamit	B	298	4.73
72	$C_6H_5NH_2$	anilin	khí	459	1.48
73	$C_6H_5NHCH_3$	metylanilin	B	298	1.64
74	$1,2\text{-}CH_3C_6H_4NH_2$	*o*-toluidin	B	293	1.58
75	$1,3\text{-}CH_3C_6H_4NH_2$	*m*-toluidin	B	293	1.44
76	$1,4\text{-}CH_3C_6H_4NH_2$	*p*-toluidin	B	293	1.31
77	$C_6H_5NHNH_2$	phenylhidrazin	B	291-292	1.65-1.79
78	C_6H_5OH	phenol	khí	450	1.40
79	$1,2\text{-}CH_3C_6H_4OH$	*o*-crezol	B		1.41
80	$1,3\text{-}CH_3C_6H_4OH$	*m*-crezol	B		1.54
81	$1,4\text{-}CH_3C_6H_4OH$	*p*-crezol	B		1.57
82	C_6H_5F	flobenzen	khí	344-507	1.57
83	C_6H_5Cl	clobenzen	khí	374-518	1.70
84	C_6H_5Br	brombenzen	khí	374-483	1.71
85	C_6H_5I	iotbenzen	B	298	1.38
86	$1,2\text{-}CH_3C_6H_4Cl$	*o*-clotoluen	B	293	1.0
87	$1,3\text{-}CH_3C_6H_4Cl$	*m*-clotoluen	B	293	1.0

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 10003 TRẦN HƯNG ĐẠO TP QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

(Bảng 7.4 - tiếp theo)

số T.T	Công thức	Hợp chất	Phương pháp đo	Nhiệt độ (°K)	Momen lưỡng cực, μ (D)
88	1,4-$CH_3C_6H_4Cl$	*p*-clotoluen	B	293	1.94
89	1,2-ClC_6H_4OH	*o*-clophenol	khí	423-598	2.17
90	1,3-ClC_6H_4OH	*m*-clophenol	B	298	2.17
91	1,4-ClC_6H_4OH	*p*-clophenol	B		2.22
92	$C_6H_5CH_2Cl$	benzyl clorua	Dec	20-160 °C	1.72
93	C_6H_5COOH	axit benzoic	B	303	1.64
94	1,2-$NH_2C_6H_4COOH$	axit *o*-aminobenzoic	D		1.51
95	1,3-$NH_2C_6H_4COOH$	axit *m*-aminobenzoic	D		2.70
96	1,4-$NH_2C_6H_4COOH$	axit *p*-aminobenzoic	D		3.51
97	C_6H_5COCl	benzoyl clorua	B	298	3.13
98	$C_6H_5CONH_2$	benzamit	D	303	3.77
99	C_6H_5CHO	benzandehit	B	298	2.77
100	$C_{10}H_8$	naphtalen	Hp	293	0.0
101	$C_{10}H_7NO_2$ (1)	α-nitronaphtalen	B	293	3.88
102	$C_{10}H_7NO_2$ (2)	β-nitronaphtalen	B	293	4.36
103	$C_{10}H_7NH_2$ (1)	α-naphtylamin	B	298	1.49
104	$C_{10}H_7NH_2$ (2)	β-naphtylamin	B	298	1.77
105	$C_{10}H_7OH$ (1)	α-naphtol	B	293-333	1.40
106	$C_{10}H_7OH$ (2)	β-naphtol	B	298	1.53
107	C_4H_4O	furan	B	293	0.67
108	C_4H_5N	pirol	B	293	1.80
109	C_5H_5N	piridin	B	298	2.20

Ghi chú: *B : trong dung dịch benzen*; *D: trong dung dịch dioxan*; *Dec: trong dung dịch decan*; *Hp: trong dung dịch heptan*

7.4. Phương pháp đo khúc xạ phân tử và độ tán sắc khúc xạ

7.4.1. Phương pháp đo khúc xạ phân tử

Khi ánh sáng truyền qua một mặt phân cách giữa hai môi trường trong suốt, tia sáng sẽ bị gãy khúc ở mặt phân cách gọi là hiện tượng khúc xạ ánh sáng. Đối với một cặp môi trường trong suốt, tỉ số giữa sin của góc tới [sin(i)] và góc khúc xạ [sin(r)] luôn là một số không đổi được gọi là chỉ số khúc xạ hay chiết suất tỉ đối của môi trường chứa tia khúc xạ (môi trường 2) đối với môi trường chứa tia tới (môi trường 1), kí hiệu là n. Giá trị n cũng bằng tỉ số giữa tốc độ truyền ánh sáng trong môi trường 1 và trong môi trường 2:

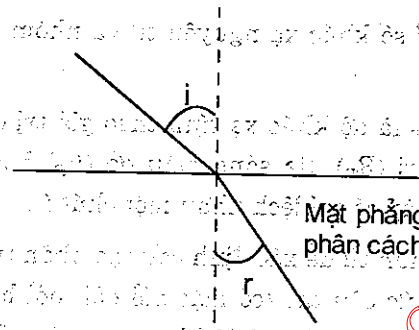
DIỄN ĐÀN HOÁ LÍ HOÁ 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

$$\frac{\sin(i)}{\sin(r)} = \frac{c_1}{c_2} = n \qquad (7.18)$$

c_1 và c_2 là tốc độ truyền ánh sáng trong môi trường 1 và trong môi trường 2.



Hình 7.13 Đường đi của tia sáng khúc xạ.

Chiết suất của một chất phụ thuộc mạnh vào nhiệt độ và chiều dài sóng của ánh sáng chiếu vào. Người ta thường sử dụng ánh sáng vạch natri vàng (vạch D, 598 nm) và đo ở một nhiệt độ nhất định, do đó giá trị chiết suất được ghi là n_D^{20} hay n_D^{25} (nhiệt độ đo ở 20°C hay 25°C). Một chất lỏng tinh khiết khi đo ở một nhiệt độ nhất định có giá trị chiết suất nhất định, nhưng khi lẫn chất bẩn thì giá trị này thay đổi, nên người ta dùng chiết suất để kiểm tra độ tinh khiết của một chất lỏng. Để đo chiết suất người ta thường dùng khúc xạ kế ABBE.

Từ giá trị chiết suất của một chất và tỉ trọng của nó có thể tính được độ khúc xạ phân tử.

Phương pháp đo độ khúc xạ phân tử được sử dụng để xác định thành phần và cấu tạo phân tử. Độ khúc xạ phân tử R được tính theo công thức:

$$R = \frac{n^2 - 1}{n^2 + 2} \cdot \frac{M}{d} \qquad (7.19)$$

ở đây n là chiết suất của chất, d là tỉ trọng, M là phân tử lượng. Đại lượng này tỉ lệ tuyến tính với độ phân cực của phân tử và có tính cộng. Nó bằng tổng chỉ số khúc xạ nguyên tử hay nhóm nguyên tử, chỉ số khúc xạ liên kết và các số gia cấu tạo:

$$R_A = \Sigma R_i \qquad (7.20)$$

Ví dụ, độ khúc xạ phân tử của hidrocacbon C_nH_{2n} bằng tổng chỉ số khúc xạ của các nguyên tử cacbon và chỉ số khúc xạ của các nguyên tử hidro và các số gia liên kết. $\Delta(C=C)$:

$$R_A(C_nH_{2n}) = nR_C + 2nR_H + R_{C=C} \qquad (7.21)$$

hoặc giá trị R bằng tổng chỉ số khúc xạ của các liên kết:

$$R_A(C_nH_{2n}) = (n-2)R_{C-C} + 2nR_{C-H} + R_{C=C} \qquad (7.22)$$

Đối với phân tử có chứa nối ba như hidrocacbon C_nH_{2n-2} thì độ khúc xạ phân tử có thể tính theo công thức:

$$R_A(C_nH_{2n-2}) = nR_C + (2n-2)R_H + R_{C=C} \qquad (7.23)$$

hoặc

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÝ - HÓA 10 BTN LƯƠNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

$$R_A(C_nH_{2n-2}) = (n-2)R_{C\text{-}C} + (2n-2)R_{C\text{-}H} + R_{C\equiv C} \quad (7.24)$$

Các giá trị R ở công thức (7.20) và (7.22) tìm trên bảng 7.5, còn các giá trị R ở công thức (7.21) và (7.23) tìm trên bảng 7.6.

Bảng 7.5 cho giá trị chỉ số khúc xạ nguyên tử và nhóm nguyên tử, bảng 7.6 cho giá trị chỉ số khúc xạ liên kết.

Các giá trị R_D, R_C và R_F là độ khúc xạ tính theo giá trị chiết suất n đo trên khúc xạ kế dùng tia sáng màu vàng natri (R_D), tia sáng màu đỏ (R_C) hoặc tia sáng màu xanh (R_F) của nguyên tử hidro. Các giá trị này có sai lệch nhau một chút ít.

Ứng dụng độ khúc xạ phân tử để xác định cấu tạo phân tử bằng cách trên cơ sở công thức cộng giả thiết một số công thức cấu tạo (có mặt nối đôi, nối ba...) rồi tính giá trị R_A (dựa vào bảng 7.5 và 7.6), sau đó so sánh với giá trị độ khúc xạ phân tử R tính được dựa vào chiết suất n, tỉ trọng d và khối lượng M (giá trị thực nghiệm) theo công thức 7.18. Nếu giá trị R_A và R của công thức nào sai lệch ít thì có thể chấp nhận để kiểm tra bằng các phương pháp vật lí khác.

Phương pháp độ khúc xạ phân tử hiện nay ít được sử dụng vì các số liệu nhận được chưa thể chứng minh rõ ràng và chắc chắn cấu tạo phân tử, đồng thời phương pháp thực nghiệm dễ mắc sai số (đo chiết suất n, tỉ trọng d của chất).

***Bảng 7.5** Chỉ số khúc xạ nguyên tử và nhóm nguyên tử.*

Nguyên tử và nhóm nguyên tử	Kí hiệu	R_D	R_C	R_F
Nhóm CH_2	CH_2	4,168	4,598	4,668
Cacbon	C	2,418	2,416	2,438
Hidro	H	1,100	1,092	1,115
Oxi				
trong OH	O'	1,525	1,522	1,531
trong ete	O<	1,643	1,639	1,649
trong C=O	O"	2,211	2,189	2,247
Clo	Cl	5,967	5,933	0,107
Brom	Br	8,865	8,803	8,999
Iot	I	13,900	13,757	14,224
Liên kết đôi C=C	|=	1,733	1,686	1,824
Liên kết ba C≡C	|≡	2,398	2,328	2,506
Nitơ				
amin bậc 1	H_2N	2,322	2,309	2,368
amin bậc 2	HN	2,502	2,478	2,561
amin bậc 3	N^3	2,840	2,808	2,940
imit	HN^2	3,776	3,740	3,877
nitrit	N^0	3,118	3,102	3,155

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Bảng 7.6 Chỉ số khúc xạ liên kết.

Liên kết	R_D	R_C	R_F
C-H	1,669	1,676	1,693
C-C	1,286	1,296	1,301
C=C	4,12	4,17	4,28
C≡C (đầu mạch)	5,80	5,82	6,00
C≡C (giữa mạch)		6,24	
C-C (vòng 3)	1,48	1,49	1,52
C-C (vòng 4)	1,36	1,37	1,38
C-C (vòng 5)	1,25	1,26	1,26
C-C (vòng 6)	1,26	1,27	1,28
C-C (vòng thơm)	2,660	2,668	2,760
C-F	1,45	1,44	1,44
C-Cl	6,48	6,51	6,58
C-Br	9,32	9,39	9,54
C-I	14,47	14,61	14,96
C-O (ete)	1,53	1,54	1,55
C-O (axetan)	1,45	1,46	1,47
C=O	3,30	3,32	3,36
C=O (metylxeton)	3,46	3,49	3,56
C-S	4,57	4,61	4,70
C=S	11,70	11,91	12,52
C-N	1,5	1,57	1,59
C=N	3,69	3,76	3,82
C≡N	4,80	4,82	4,87
O-H (rượu)	1,65	1,66	1,67
O-H (axit)	1,80	1,80	1,83
S-H	4,77	4,80	4,87
S-S	8,02	8,11	8,28
S-O	4,88	4,94	5,03
S→O	-0,17	-0,20	-0,27
N-H	1,76	1,76	1,79
N-O	1,93	1,95	1,99
N→O	1,78	1,78	1,80
N=O	3,96	4,00	4,07
N-N	1,95	1,99	2,02
N=N	4,09	4,12	-

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Ví dụ 1:

Xác định cấu tạo của hợp chất $C_6H_{11}Cl$ có chiết suất n_D^{20}=1,4626 và tỉ trọng d_4^{20}=1,0000.

Giải:

Theo công thức 7.18 tính độ khúc xạ R_D của hợp chất:

$$R_D = \frac{1,4626^2 - 1}{1,4626^2 + 2} x \frac{118,65}{1,0000} = 32,61$$

Từ công thức cộng có thể giả thiết có hai công thức cấu tạo là cấu tạo vòng no (I) và cấu tạo mạch thẳng (II) có chứa một liên kết đôi. Ta tính giá trị R_A theo hai công thức trên dựa vào giá trị R_D của bảng 7.5:

- theo công thức I:

$R_A=6R_C+11R_H+R_{Cl}$

$R_A=6.2,418+11.1,100+5,967=$**32,575**

- theo công thức II:

$R_A=6R_C+11R_H+R_{Cl}+R_{C=C}$

$R_A=6.2,418+11.1,100+5,967+1,733=$**34,308**

Như vậy, giá trị R_A của công thức II có nối đôi khác với giá trị R, lớn hơn công thức I dạng vòng, do đó phân tử này có nhiều khả năng là công thức vòng (I).

Ví dụ 2:

Acrolein phản ứng với đimetylhidrazin bất đối xứng cho sản phẩm là chất lỏng có chiết suất n_D^{20}=1,4269 và tỉ trọng d_4^{20}=0,8696. Hãy xác định công thức cấu tạo của sản phẩm.

Giải:

Theo tính chất hóa học của andehit thì phản ứng có thể xảy ra theo sơ đồ sau:

$$CH_2=CH-CH=O + H_2N-N(CH_3)_2 \rightarrow CH_2=CH-CH=N-N(CH_3)_2 \ (I)$$

Từ bảng 7.6 có thể tính độ khúc xạ phân tử của công thức (I) trên R_D của các liên kết:

$R_A=R_{C-C}+R_{C=C}+R_{C=N}+2R_{C-N}+R_{N-N}+10R_{C-H}$

$R_A=1,296+4,17+3,76+2.1,57+1,99+10.1,676=$**31,116.**

Giá trị R_D thực nghiệm tính được theo chiết suất, tỉ trọng và khối lượng phân tử là:

$$R_D = \frac{1,4296^2 - 1}{1,4296^2 + 2} x \frac{998,15}{0,8696} = 28,97$$

Ta nhận thấy giá trị R_D và R_A khác nhau rất xa:

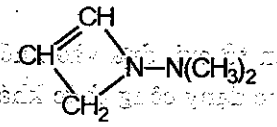
$$\Delta R=R_A-R_D=31,116-28,97=2,146$$

do đó có thể giả thiết sản phẩm có cấu tạo khác, ví dụ như:

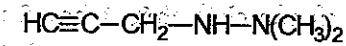
DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ HÓA 10000 TRẦN NHƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM



(II)



(III)

áp dụng công thức tính R_A theo bảng 6.6 nhận được:

- công thức II:

$R_A=R_{C-C}+R_{C=C}+R_{C=N}+4R_{C-N}+R_{N-N}+10R_{C-H}$

$R_A=1,296+4,17+4.1,57+1,99+10.1,676=\mathbf{30,496}$

$\Delta R=30,496-28-97=1,526$

- công thức III:

$R_A=R_{C-C}+3R_{C-N}+R_{N-N}+R_{C=N}+9R_{C-H}$

$R_A=1,296+3.1,57+1,99+5,82+1,76+9.1,676=\mathbf{30,66}$

$\Delta R=30,66-28,97=1,69$

Từ các giá trị tính R_A của các công thức I, II và III thấy hiệu số chênh lệch của công thức II là nhỏ nhất. Tuy nhiên để kết luận công thức nào là chắc chắn vẫn cần sử dụng các phương pháp vật lí khác.

7.4.2. Phương pháp độ tán sắc khúc xạ

Độ khúc xạ phân tử R của một chất sẽ khác nhau khi đo chiết suất n bằng các tia sáng khác nhau, do đó hiệu số độ khúc xạ phân tử đối với chiều dài sóng λ_1 và λ_2 được gọi là độ tán sắc khúc xạ và cũng có tính chất cộng:

$$R_{\lambda_1}-R_{\lambda_2}=\sum_i R_{i\lambda_1}-\sum_i R_{i\lambda_2}=\sum\left(R_{\lambda_1}-R_{\lambda_2}\right)_i \qquad (7.25)$$

Có thể cộng các giá trị $\left(R_{\lambda_1}-R_{\lambda_2}\right)_i$ của các nguyên tử (gọi là độ tán sắc nguyên tử) trong phân tử để xác định cấu tạo phân tử. Các giá trị về độ tán sắc nguyên tử cho ở bảng 7.5. Theo phương pháp này, nếu công thức phân tử của chất nghiên cứu được xác lập trước qua phân tích nguyên tố thì việc xác lập công thức cấu tạo thuận lợi, còn nếu không có công thức phân tử trước sẽ phức tạp hơn nhiều.

Ví dụ:

Một hợp chất chứa oxi có khối lượng phân tử gần 100, chỉ số khúc xạ $n_F^{20}=1,4462$, $n_C^{20}=1,4370$ và tỉ trọng $d_4^{20}=0,8472$. Hãy xác định công thức cấu tạo của nó.

Giải:

Trước hết tính độ tán sắc khúc xạ phân tử theo công thức 7.18 và 7.24:

$$R_F-R_C=\left(\frac{n_F^2-1}{n_F^2+2}-\frac{n_C^2-1}{n_C^2+2}\right)\frac{M}{d}=(0,2668-0,2620)\frac{100}{0,8470}=0,576$$

R_F và R_C là độ khúc xạ tính theo giá trị chiết suất n_F và n_C được đo trên khúc xạ kế dùng

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÝ - HÓA 10003 TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

tia sáng màu đỏ và màu xanh của nguyên tử hidro.

Giả thiết phân tử của chất chứa 1 hay 2 nguyên tử oxi, dựa vào khối lượng phân tử có thể giả thiết một số công thức cộng, sau đó giả thiết các dạng công thức khác nhau để tính các độ khúc xạ phân tử R_A theo bảng 7.5 ta nhận được bảng sau:

số T.T.	Công thức	(R_F-R_C)	số T.T.	Công thức	(R_F-R_C)
1	$C_6H_{14}O'$	0,478	8	$C_5H_{12}O'$	0,413
2	$C_6H_{12}O''$	0,483	9	$C_5H_{10}O'O''$	0,418
3	$C_6H_{12}O'\vert=$	0,570	10	$C_5H_{10}O'_2\vert=$	0,505
4	$C_6H_{10}O''\vert=$	0,575	11	$C_5H_8O''_2$	0,423
5	$C_6H_{10}O'\vert=_2$	0,662	12	$C_5H_8O'_2\vert=_2$	0,597
6	$C_6H_{10}O'\vert\equiv$	0,525	13	$C_5H_8O'_2\vert\equiv$	0,460
7	$C_6H_8O''\vert\equiv$	0,530	14	$C_5H_8O'O''$	0,510

(Các kí hiệu ghi trên công thức xem bảng 7.5)

So sánh các giá trị (R_F-R_C) tính ở trên với các giá trị thu được ở bảng trên thấy công thức số 3 và 4 có giá trị (R_F-R_C) xấp xỉ nhau nên chất có thể có công thức cấu tạo như 3 hoặc 4.

Độ tán sắc khúc xạ của các hợp chất hữu cơ có chứa nối đôi khác nhau rất nhiều phụ thuộc vào số lượng và vị trí nối đôi trong phân tử, do đó người ta đã sử dụng đại lượng độ tán sắc riêng δ_{FC} và tỉ số tán sắc ω_{FCD} vào việc xác định thành phần hidrocacbon trong dầu mỏ:

$$\delta_{FC} = \frac{n_F - n_C}{d}.10^4 \qquad (7.26)$$

$$\omega_{FCD} = \frac{n_F - n_C}{n_D - 1}.10^3 \qquad (7.27)$$

Bảng 7.7 cho mối liên quan giữa tỉ số tán sắc ω_{FCD} và n_D^{20} với các dãy hợp chất hidrocacbon tương ứng trong khoảng nhiệt độ sôi 30-100°C và 150-200°C. Phương pháp này có thể giúp xác định thành phần hidrocacbon đi ra từ cột sắc kí lỏng trong mỗi phân đoạn.

Ví dụ:

Hidrocacbon có điểm sôi gần 180°C và chiết suất n_D^{20} 1,4465, n_C^{20} 1,4441 và n_F^{20} 1,4519.

Giải:

$$\omega_{FCD} = \frac{1,4519 - 1,4441}{1,4465 - 1}.10^3 = 17,5$$

Từ bảng 7.7, đối chiếu giá trị có thể tìm thấy phân đoạn chất không chứa nối đôi và là xicloparafin (xem phần đoạn sôi 150-200°C).

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÝ - HÓA 1000 BTRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Bảng 7.7 Độ tán sắc tương đối của các hidrocacbon (Bảng phân loại).

ω_{FCD}	Số liên kết bội	Vị trí liên kết bội	n_D^{20}	Lớp hidrocacbon	Ghi chú
			Nhóm I. Nhiệt độ sôi 30-100°C (C_5-C_7)		
17-18	0	-	<1,397 >1,405	Parafin. Naphten.	Xiclopropan và xiclobutan có giá trị n_D trung gian
19,8-23,2	1	-	1,364-1,412	Olefin, axetilen.	Trừ: metylxiclobuten, $Đ_{sôi}$38°C, n_D^{20} 1,403
		-	1,429-1,436	Các hidrocacbon vòng không no.	2,3-Dimetyl-2-penten, $Đ_{sôi}$98°C, n_D^{20} 1,421
		-	1,446	Xiclohexen.	$Đ_{sôi}$83°C
24-25	2	cách	1,401-1,422	Các dien no thẳng dạng diallyl.	
27-31	2		1,415-1,435 1,440-1,446 1,463-1,475	Allen. Xiclopentadien, metylxiclopentadien.	Các đồng đẳng isopropenylaxetilen (ω_{FCD}=33,2) và diaxetilen (ω_{FCD}=33,3)
33-40	2		1,421-1,459 1,465	Các đồng đẳng divinyl. 2-Xiclopropyl-1,2-butadien.	$Đ_{sôi}$99°C
33,3	3	vòng benzen	1,501	Benzen.	$Đ_{sôi}$80°C
(51)	3		1,490-1,504	Hexatrien, các hexa-dienin.	
			Nhóm II. Nhiệt độ sôi 100-150°C (C_7-C_8)		
17-18	0	-	<1,422 >1,418	Parafin. Naphten.	-
19-23	1	-	1,399-1,433	Olefin, axetilen.	-
19-23	1	-	1,431-1,459	Các hidrocacbon với vòng từ 4-7 C và 1 liên kết bội.	Trừ: hidrocacbon bixiclo: β'-tuien, $Đ_{sôi}$147-151°C, n_D^{20} 1,447; isophenxen, $Đ_{sôi}$139-141°C, n_D^{20} 1,449

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 10000 TRẦN HƯNG ĐẠO TP QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

ω_{FCD}	Số liên kết bội	Vị trí liên kết bội	n_D^{20}	Lớp hidrocacbon	Ghi chú
19-23			1,459-1,468	Bixiclen.	
			1,461	Metylenxicloheptan	$Đ_{sôi}$138-140°C
			1,468-1,474	Xiclooctan.	$Đ_{sôi}$143-146°C
			1,475	4-Metylbixiclo-[2,2,2]-octen-1.	$Đ_{sôi}$147-149°C
24-25	2	cách	1,421-1,446	Dien no mạch thẳng dạng diallyl.	Có lẽ cũng là các điin và enin (n_D^{20} 1,45-1,47)
			1,481	1,5-Dimetylen-spiro-[3,3]-heptan ($Đ_{sôi}$135°C).	không có số liệu về độ tán sắc.
			1,496	1,5-Xiclooctadien.	
27-32	2	cumulen hoá, liên hợp trong vòng	1,428-1,450	Allen.	$Đ_{sôi\ 17}$ 50-52°C.
			1,460-1,490	Các hidrocacbon với vòng từ 4-6 C và 2 liên kết bội.	Xem ghi chú nhóm I tương ứng.
			1,492-1,498		$Đ_{sôi}$145-151°C
			1,501-1,505	1-Etinyl-1xiclohexen. 1,3-Xicloheptadien.	$Đ_{sôi\ 720}$118-121°C
30-32,3	3	vòng benzen	1,495-1,506	Toluen, xilen, etylbenzen.	-
32-39	2	liên hợp	1,449-1,480	Đồng đẳng của divinyl.	-
			1,487	1-Metyl-3-metylen-1-xiclohexen.	$Đ_{sôi}$134-138°C
			1,500	4-Xiclopropyl-1,3-pentadien.	$Đ_{sôi\ 50}$60-62°C
36-39	3	liên hợp trong vòng	1,523-1,527	Tropiliden.	$Đ_{sôi}$114-117°C
	4		1,539-1,542	Xiclooctatetraen.	$Đ_{sôi\ 17}$ 42-43°C
41-42	4	-	1,548-1,549	Phenylaxetilen.	$Đ_{sôi}$140-145°C
42-44	4	-	1,545-1,597	Stiren.	$Đ_{sôi}$146°C
(59-60)	3	liên hợp	1,481-1,531	Trien và dienin thẳng.	-
Nhóm III. Nhiệt độ sôi 150-200°C (C_9-C_{12})					
17-18	0			Các parafin (n_D^{20}<1,432) và các xicloparafin.	-
19-21,8	1	-	1,417-1,441	Các olefin và các axetilen.	3,3-Dimetyl-2-tert-butyl-1-penten, $Đ_{sôi}$176-181°C, n_D^{20} 1,450; α-tuin, $Đ_{sôi}$151-152°C, n_D^{20} 1,449
			1,446-1,473	Các hidrocacbon có vòng 5-8 và liên kết bội.	
			1,459-1,499	Các hidrocacbon bixiclo có nối đôi.	

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 10000 THÀNH ĐẠO HƯNG QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

(Bảng 7.7- tiếp theo)

ω_{FCD}	Số liên kết bội	Vị trí liên kết bội	n_D^{20}	Lớp hidrocacbon	Ghi chú
22.1-24.7	2	cách	1,433-1,456	Các dien mạch thẳng.	Trừ: xabinen, $Đ_{sôi}$162-166°C, n_D^{20} 1,467.
	2	cumulen hoá	1,466-1,491	Các hidrocacbon vòng 6 cạnh và có nối đôi cách.	
			1,514	Dixiclopentadien.	$Đ_{sôi}$170°C.
			1,502-1,509	Các allen vòng.	
25	3	cách	1,474	2,6-Dimetyl-2,5,8-nonantrien.	$Đ_{sôi}$81-82°C.
(>25)	3	liên hợp	1,464-1,464	Các dien và diin mạch thẳng.	Không có số liệu thực nghiệm về độ tán sắc.
27-32.4			1,465-1,500	Các hidrocacbon vòng 4-6 cạnh và có 2 nối đôi.	
27.2-30.9	3		1,489-1,505	Đồng đẳng của benzen C_9-C_{11}.	
	2				
	3		1,497-1,532	Các hidrocacbon bixiclo có hai nối đôi.	
			1,498-1,501	Metylmentatrien.	$Đ_{sôi}$197°C.
			1,528	Xiclopropylbenzen, xiclobutylbenzen.	
31.3-31.9	3		1,535-1,539	Indan.	$Đ_{sôi}$178°C.
29-35			1,471-1,546	Các hidrocacbon mạch thẳng dạng misen và osimen (2 nối đôi liên hợp và 1 nối đôi cách).	
30.3-32.6	4	vòng benzen và 1 nối đôi cách	1,506-1,512	Allylbenzen và đồng đẳng (đến C_{11}).	Trừ: o-metylallylbenzen, $Đ_{sôi}$181-183°C, n_D^{20} 1,519
36-39	3	liên hợp	1,508-1,518	Các hidrocacbon semibenzen.	-
32.6-43	4	vòng benzen và 1 liên kết bội liên hợp	1,513-1,556	Đồng đẳng của stiren.	-
			1,527-1,561	Đồng đẳng của phenylaxetilen.	-
			1,560-1,565	Các metylinden (1 và 2).	-
40			1,574-1,577	Inden.	$Đ_{sôi}$182°C
40-42	5	vòng benzen và 2 vòng cumulen hay các liên kết liên hợp	1,513-1,567	Phenylallen và phenopren.	-
(52-61)	3	liên hợp	1,517-1,544	Trien mạch thẳng với các liên kết bội liên hợp	

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP.QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org

Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Chương 8

MỘT SỐ VÍ DỤ KẾT HỢP CÁC PHƯƠNG PHÁP PHỔ GIẢI THÍCH CẤU TẠO HỢP CHẤT HỮU CƠ

Sự kết hợp các phương pháp phổ giải thích cấu tạo hợp chất hữu cơ có ý nghĩa quan trọng vì nó giúp cho việc xác định cấu tạo một cách chính xác và nhanh chóng. Từ mỗi phương pháp cho các lượng thông tin khác nhau, bổ trợ cho nhau.

Phổ hồng ngoại: tìm sự có mặt của các nhóm chức (C=C, C≡C, C=O, OH, NH_2, C≡N, phenyl,...), cấu trúc không gian (cis và *trans*), đồng phân thế ở benzen.

Phổ tử ngoại: xác định hợp chất có nối đôi liên hợp hay không, hoặc là hợp chất vòng thơm hay không...Nó không có ý nghĩa đối với hợp chất bão hoà hay nối đôi biệt lập. Phương pháp này đặc biệt quan trọng cho việc nghiên cứu các hợp chất vòng thơm, dị vòng, các phức chất, các dạng tautome...

Phổ cộng hưởng từ hạt nhân proton: xác định sự có mặt của các nhóm chức có chứa proton trong phân tử, xét tương tác spin-spin giữa các hệ proton suy ra cấu trúc không gian của phân tử.

Phổ cộng hưởng từ hạt nhân cacbon-13: xác định sự có mặt và cấu trúc của các nguyên tử cacbon trong phân tử.

Phổ khối lượng: xác định khối lượng phân tử, dựa vào ion đồng vị cacbon tính được số cacbon trong phân tử, dựa vào qui luật phân mảnh phân tử để khẳng định lại cấu tạo dự kiến qua thông tin của các phương pháp phổ khác.

Việc kết hợp các phương pháp phổ trên cho ta khá đầy đủ thông tin để khẳng định cấu tạo của một chất, tuy nhiên người ta vẫn cần đến các dữ kiện khác như các hằng số vật lí, phân tích nguyên tố và đối với các phân tử phức tạp thì các thông tin của phổ Rơnghen có ý nghĩa rất quan trọng.

Dưới đây trình bày tóm tắt một số ví dụ về kết hợp các phương pháp phổ giải thích cấu tạo phân tử.

Ví dụ 1:

Hợp chất chứa halogen, M=156 có phổ hồng ngoại, phổ cộng hưởng từ nhân proton và phổ khối lượng chỉ ra ở hình 8.1.

Bài giải:

Dựa vào các dữ kiện phổ:

Phổ IR: Không có mặt nhóm chức (4000-1600 cm^{-1}), chỉ có hấp thụ của CH: ν_{C-H} 3000-2860 cm^{-1} và δ_{C-H} 1445, 1380 cm^{-1}. Đỉnh 1210 cm^{-1} có cường độ cao có thể là của ete thơm hoặc không no, nhưng các phổ khác không xác nhận sự có mặt của nhóm này, do đó chỉ có thể là của liên kết C-halogen.

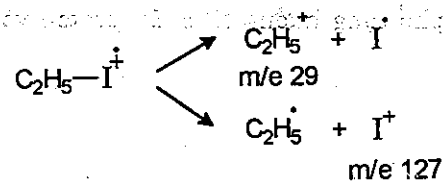
Phổ ^{1}H-NMR: Hệ phổ 4 đỉnh (δ=3,2 ppm) và 3 đỉnh (δ=1,8 ppm) với tỉ lệ đường cong tích phân 2:3 xác nhận sự có mặt của nhóm CH_3CH_2- trong phân tử (J=6 Hz).

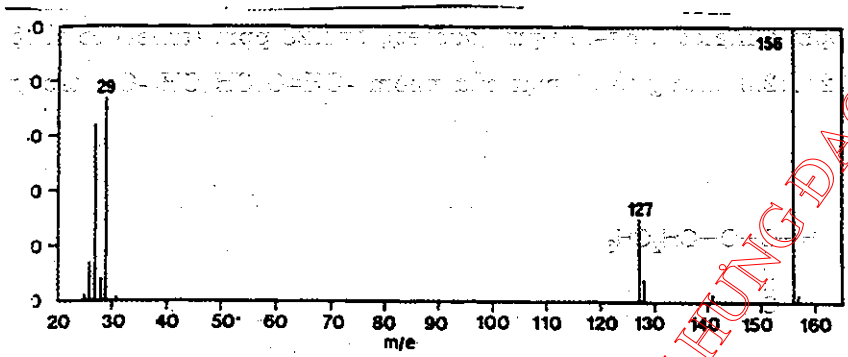
ĐỀN ĐÁI TOÁN - LÍ HÓA 10 OLP TRẦN HƯNG ĐẠO TP QUY NHƠN

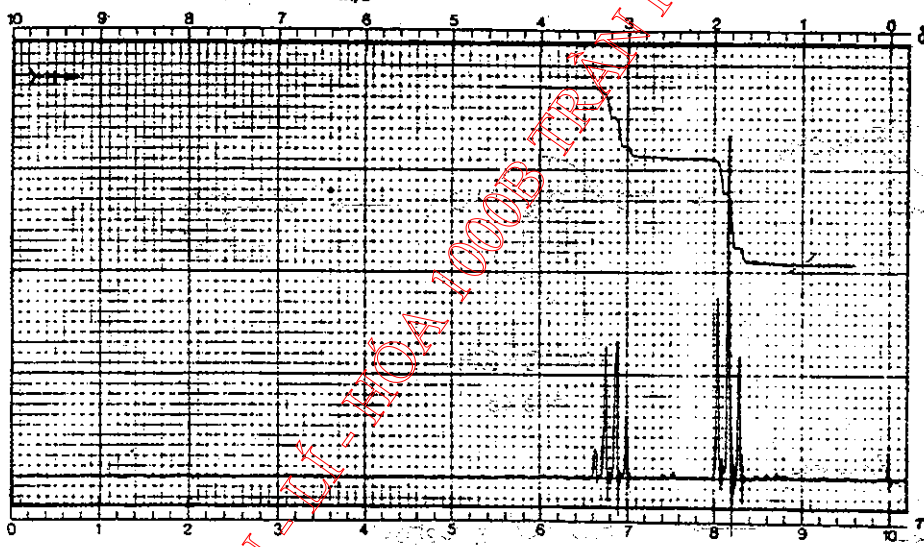
https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

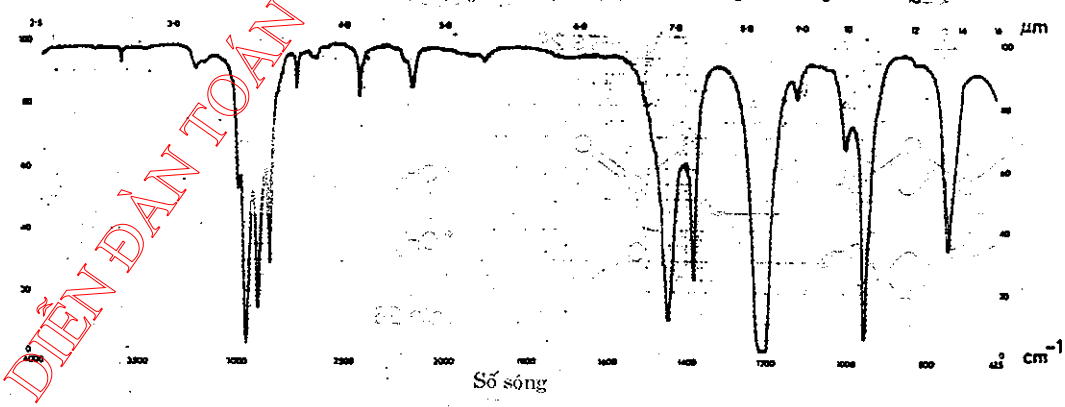
WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Phổ MS: M^+-29 (C_2H_5)=127 (nguyên tử lượng của iot)









Hình 8.1

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 10000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org

Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú

WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Ví dụ 2:

Hợp chất có M=74, phổ hồng ngoại, phổ cộng hưởng từ nhân proton và phổ khối lượng chỉ ra ở hình 8.2.

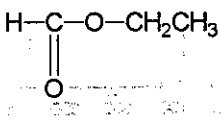
Bài giải:

Dựa vào các dữ kiện phổ:

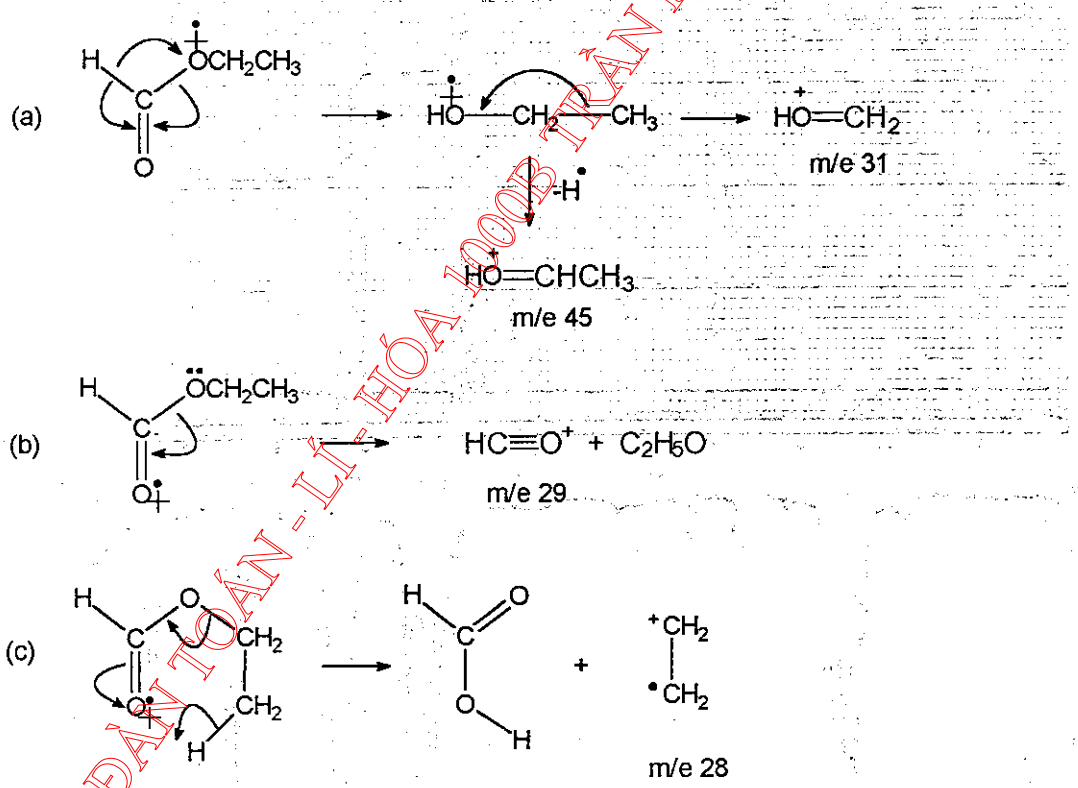
Phổ IR: Có mặt nhóm chức este: $\nu_{C=O}$ 1730 cm^{-1} và ν_{C-O} 1180 cm^{-1}; có thể là este fomat, có mặt C-H thẳng ν_{C-H} 3000-2900 cm^{-1}, δ_{C-H} 1460-1380 cm^{-1}.

Phổ ^{1}H-NMR: δ=8,3 ppm (singlet), δ=4,3 ppm (quatet), δ=1,28 ppm (trilet) có tỉ lệ đường cong tích phân 4:8:12=1:2:3 chứng tỏ có mặt của nhóm -CH=O, CH_3CH_2-O- trong phân tử (J=7 Hz).

Công thức dự kiến:



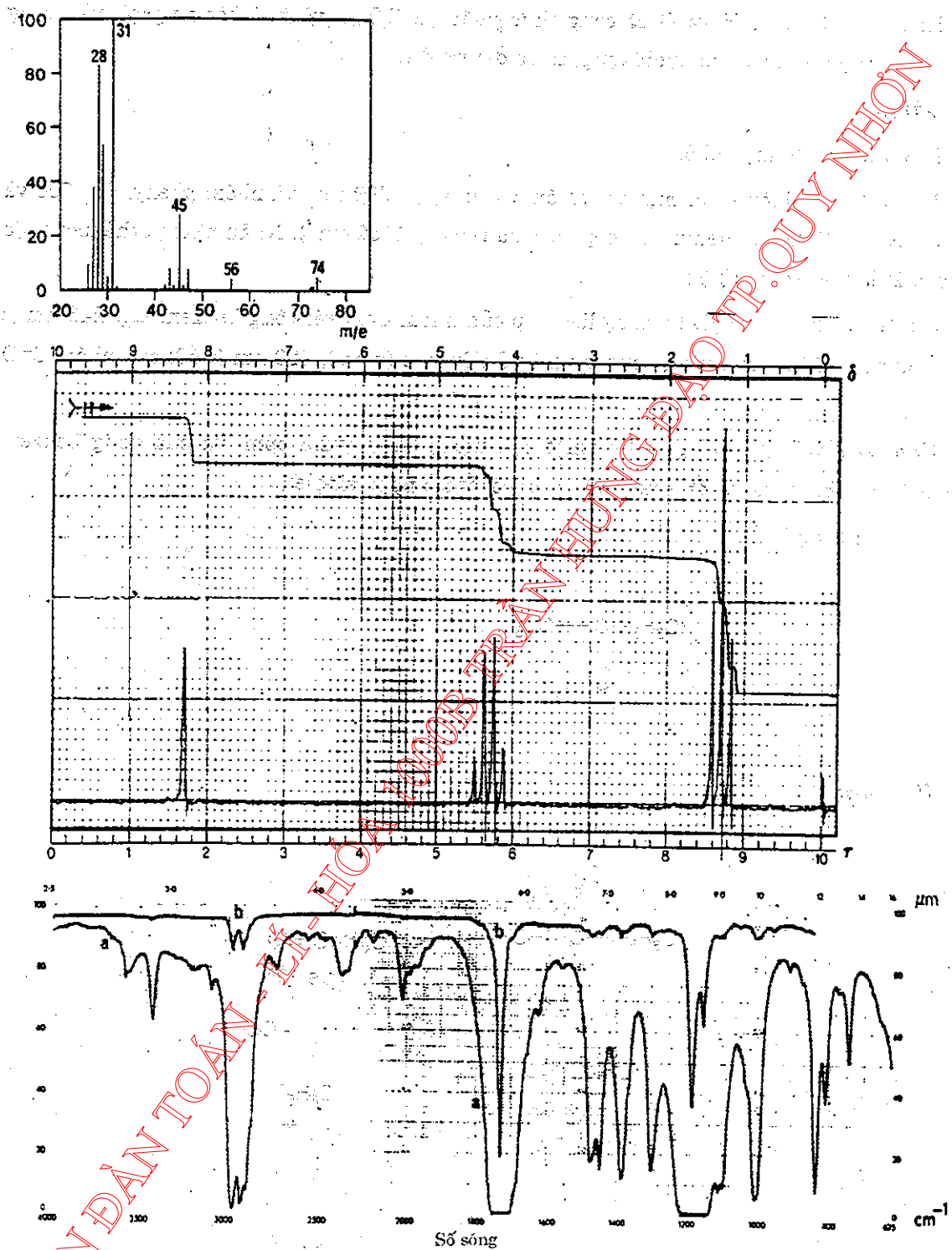
Phổ MS:



DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP.QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM



Hình 8.2

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA HOCMAI.VN TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Ví dụ 3:

Hợp chất chứa C, H và O có công thức phân tử C_8H_8O và phổ hồng ngoại, phổ cộng hưởng từ nhân proton và phổ khối lượng chỉ ra ở hình 8.3.

Bài giải:

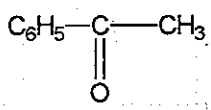
Dựa vào các dữ kiện phổ:

Phổ IR: Biểu hiện sự có mặt của nhóm C=O: $\nu_{C=O}$ 1690 cm^{-1} và nhóm phenyl δ_{C-H} 760 và 690 cm^{-1}. Nhóm C=O và phenyl liên hợp với nhau (ν_{phenyl} 1580 cm^{-1}). Nhân phenyl thế mono, do đó hợp chất là một xeton thơm.

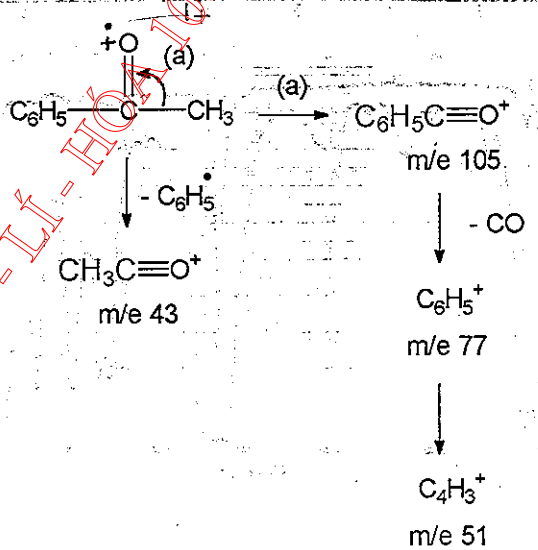
Phổ UV: Phổ tử ngoại chỉ ra sự liên hợp của nhóm C=O với vòng benzen: λ_{max} 246 nm (ε 9800), 280 nm (ε 1100) của vòng benzen và C=O liên hợp ($\pi \rightarrow \pi^*$), 320 nm (ε 50) của nhóm C=O ($n \rightarrow \pi^*$).

Phổ ^{1}H-NMR: Xác nhận sự có mặt của nhóm CH_3, δ=2,5 ppm, và của vòng benzen: 2H(ortho) có δ=8,2 ppm và 3H (meta và para) có δ=8,5 ppm (singlet).

Công thức dự kiến:



Phổ MS:

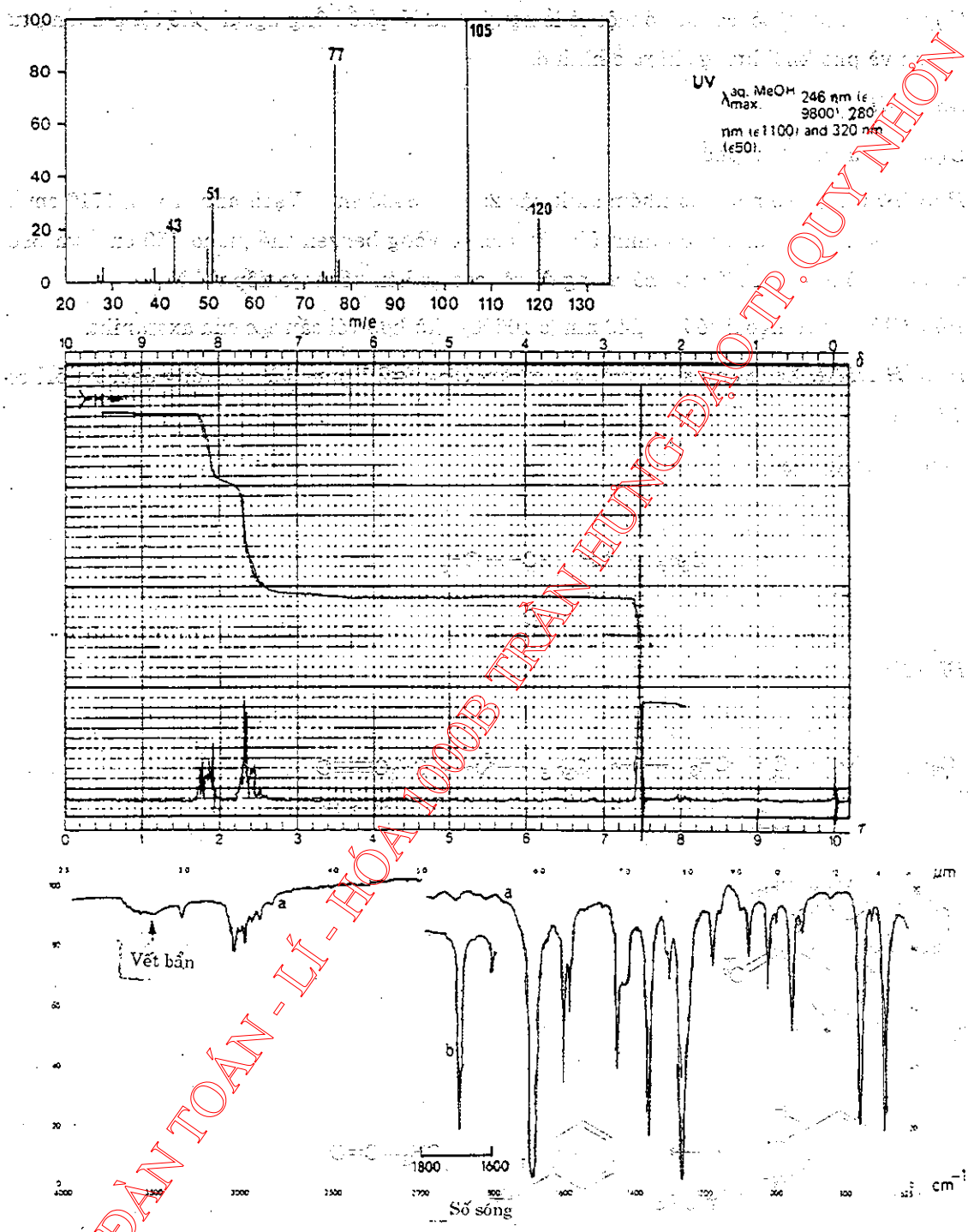


Khẳng định là đúng.

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM



DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 10000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

Hình 8.3

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

Ví dụ 4:

Hợp chất có M^+=135, có thể có một số lẻ nguyên tử N, phổ hồng ngoại, phổ cộng hưởng từ nhân proton và phổ khối lượng chỉ ra ở hình 8.4.

Bài giải:

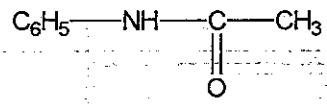
Dựa vào các dữ kiện phổ:

Phổ IR: Chỉ ra có mặt của nhóm amit bậc 2: ν_{N-H} 3430 cm^{-1}. Vạch amit I $\nu_{C=O}$ 1710 cm^{-1}, vạch amit II δ_{N-H} 1550 cm^{-1}, vạch amit III 1320 cm^{-1}. Vòng benzen thế mono 750 cm^{-1} và 690 cm^{-1}, dao động vòng $\nu_{C=C}$ 1600 cm^{-1} có cường độ rất cao do liên kết trực tiếp với N.

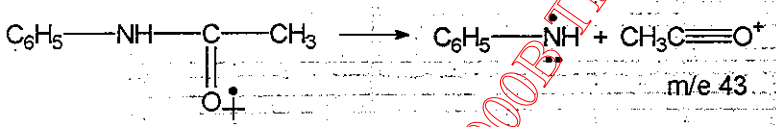
Phổ UV: Phổ tử ngoại có λ_{max} 240 nm (ε 10600) phù hợp với cấu tạo của axetanilit.

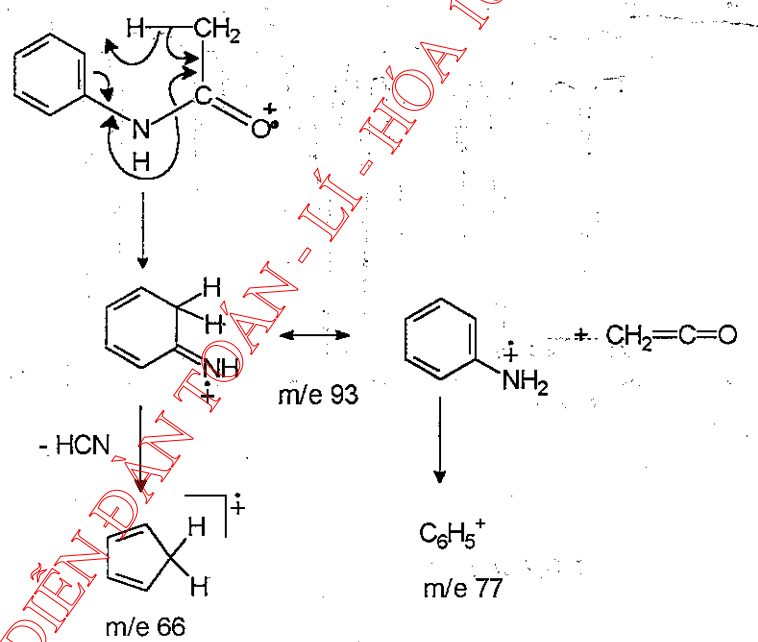
Phổ ^{1}H-NMR: Xác nhận sự có mặt của nhóm CH_3, δ=2,1 ppm, và của vòng benzen: 5H có δ=7,1-7,5 ppm.

Công thức dự kiến:



Phổ KL:

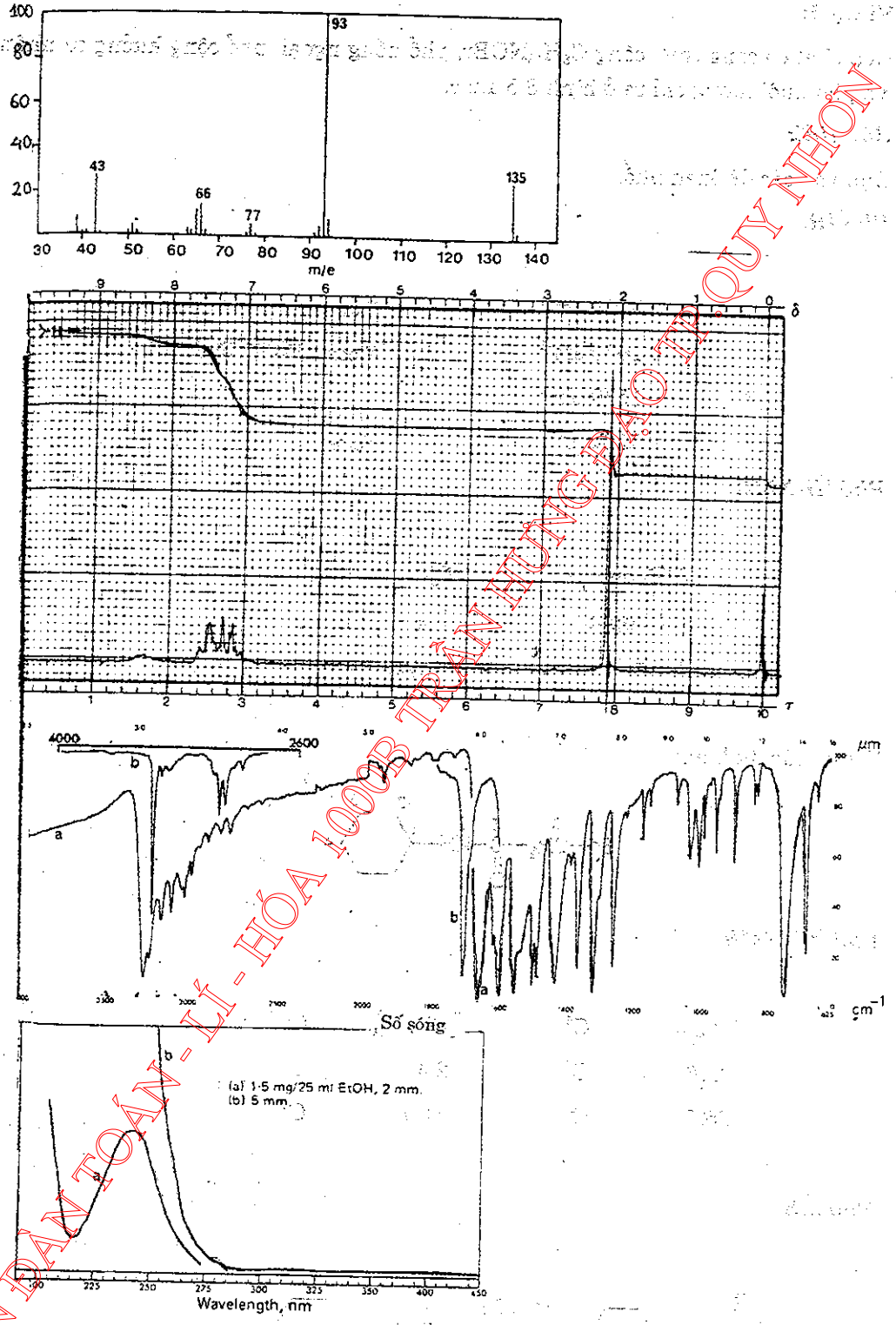




DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM



Hình 8.4

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP.QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Ví dụ 5:

Hợp chất có công thức cộng $C_8H_{13}NOBr$, phổ hồng ngoại, phổ cộng hưởng từ nhân proton và ^{13}C và phổ khối lượng chỉ ra ở hình 8.5 a,b,c.

Bài giải:

Dựa vào các dữ kiện phổ:

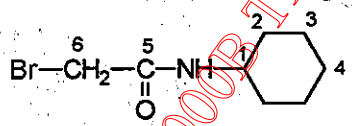
Phổ IR:

3400 cm^{-1}	ν_{N-H}
1670 cm^{-1}	ν_{-CONH-} (amit thế)
1530 cm^{-1}	
700 cm^{-1}	ν_{C-Br}

Phổ ^{1}H-NMR:

3,85 ppm	δ_{CH2}
6,40 ppm	δ_{NH}
1-2 ppm	$\delta_{vòng\ no}$

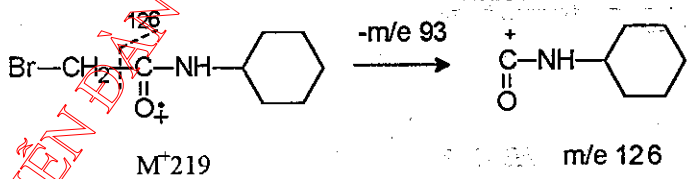
Công thức dự kiến:



Phổ ^{13}C-NMR:

165,4	C^5	49,1	C^6
32,6	C^2	2,4	C^1
25,6	C^4	24,9	C^3

Phổ MS:



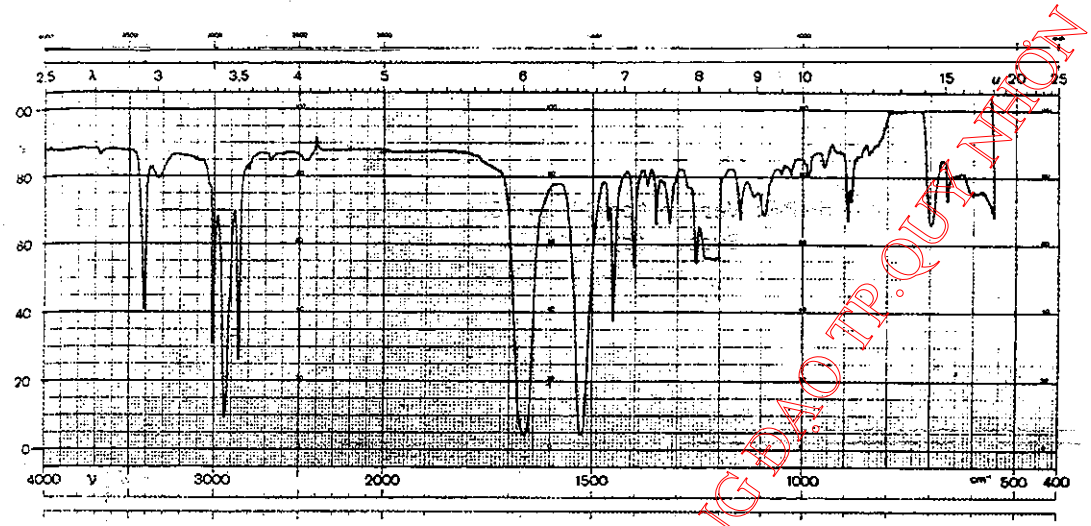
M^+ 219

m/e 126

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

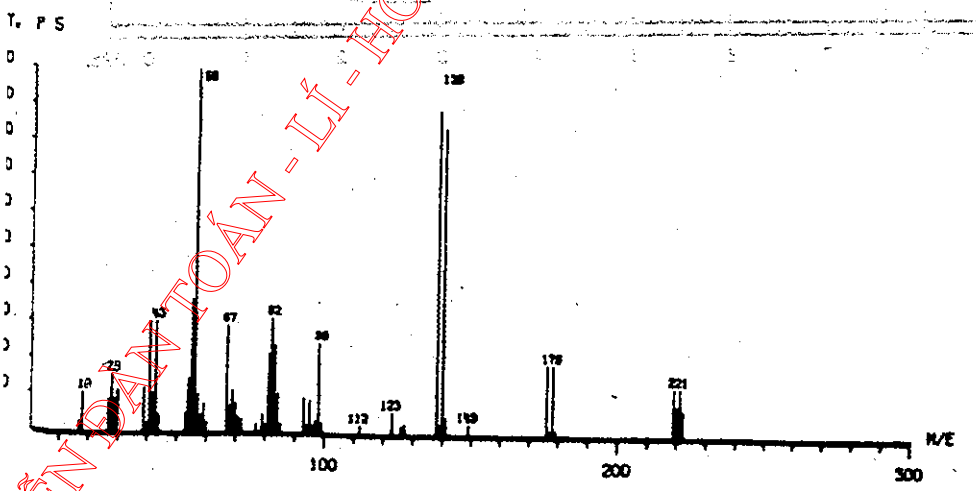
WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM



IR: Perkin-Elmer Modell 125
Ghi trong, $CHCl_3$

MS: Hitachi Perkin-Elmer
Modell RMU-6M

m*	m_1	$\longrightarrow$	m_2	+	$(m_1 - m_2)$
87	219		138		81
68,8	98		82		16
54	82		67		15
47,2	95		67		28
38,5	83		55		28

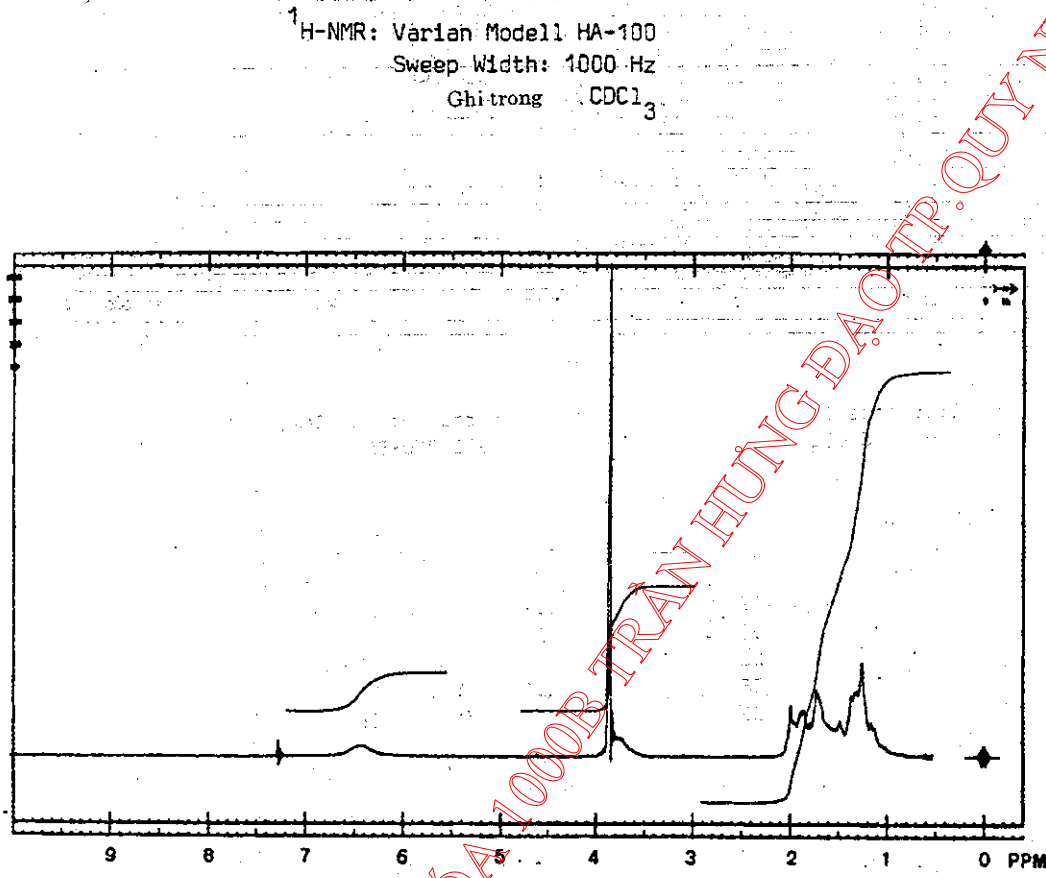


Hình 8.5 a

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

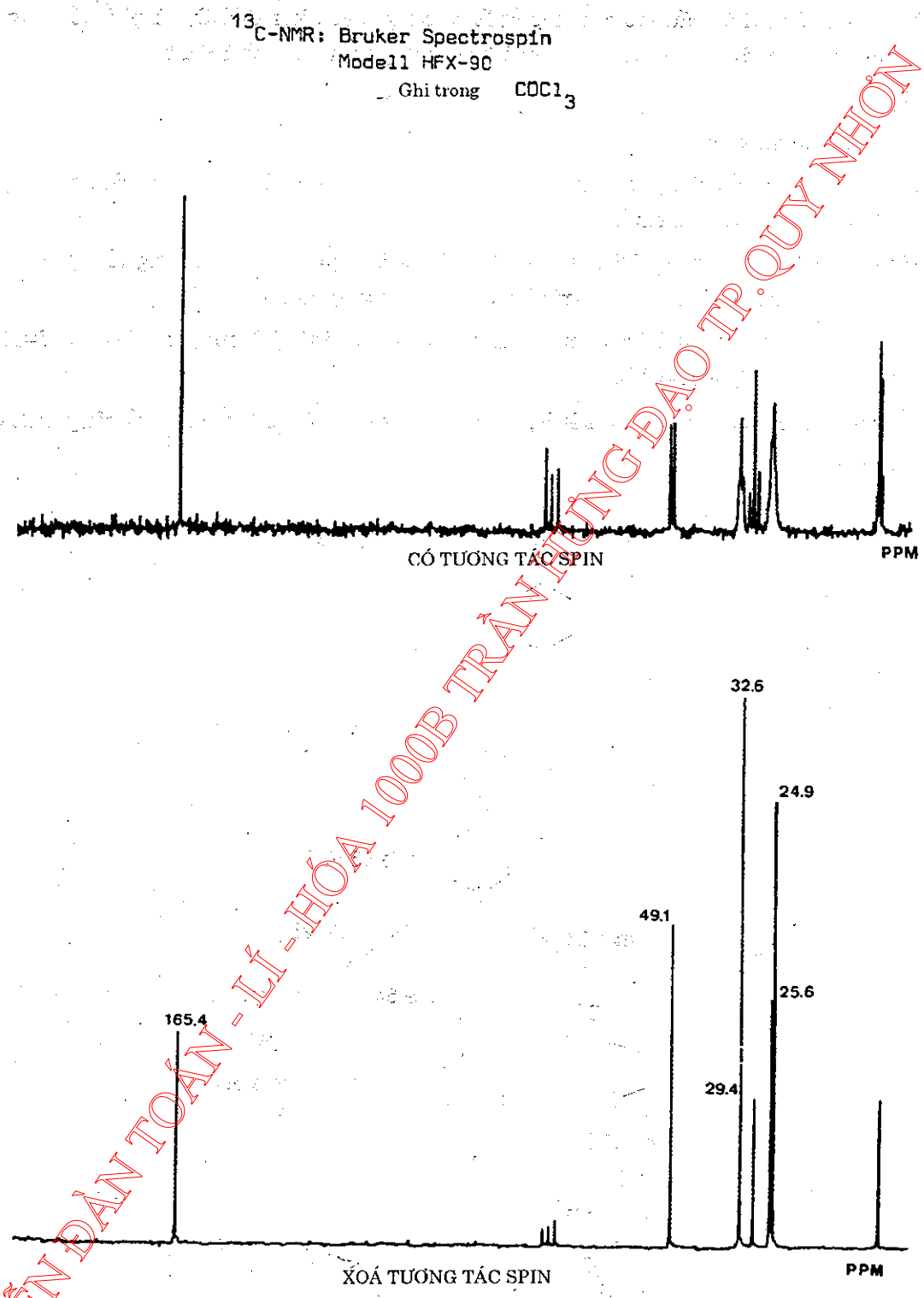


Hình 8.5 b

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM



DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

Hình 8.5 c

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

Ví dụ 6:

Xác định công thức cấu tạo của hợp chất có công thức cộng $C_5H_4O_2$ và phổ hồng ngoại, phổ cộng hưởng từ nhân proton và ^{13}C và phổ khối lượng chỉ ra ở hình 8.6 a,b.

Bài giải:

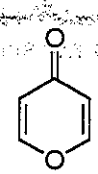
Dựa vào các dữ kiện phổ:

Phổ IR: Chỉ ra tần số đặc trưng $\nu_{=CH}$ ở 3020 cm^{-1}, $\nu_{C=O}$ ở 1680 $^{cm-1}$, $\nu_{C=C}$ ở 1640 cm^{-1}, ν_{C-O-C} ở 1240 cm^{-1}, $\delta_{=CH}$ ở 920 và 860 cm^{-1}.

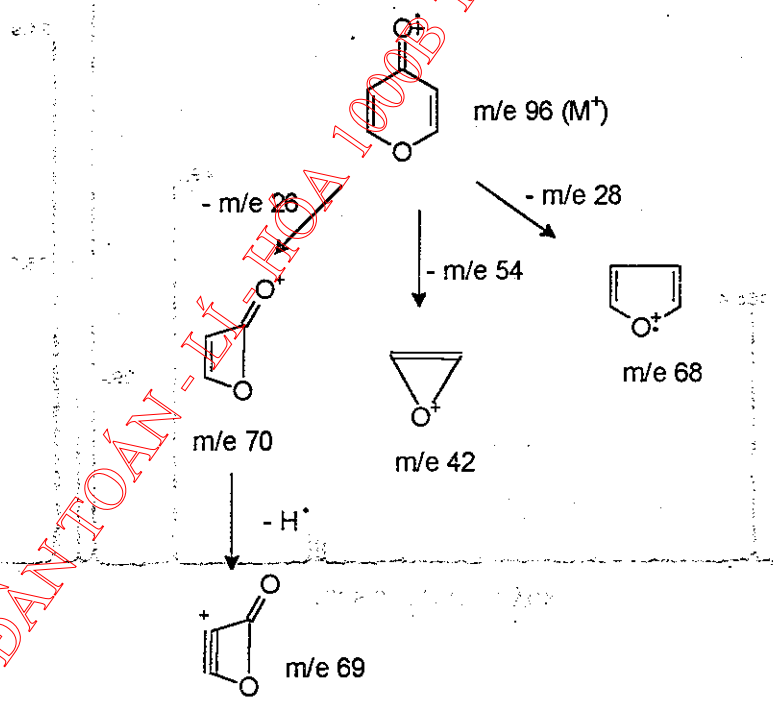
Phổ ^{1}H-NMR: Chỉ ra δ=7,8 ppm (duplet) và δ=6,4 ppm (duplet) chứng tỏ hợp chất có chứa hai nối đôi dạng -CH=CH- có vị trí không gian tương tự nhau.

Phổ ^{13}C-NMR: Có δ=177,8 ppm (singlet) của C=O, δ=156,0 ppm (duplet) và δ=118,0 ppm(duplet) của nối đôi -CH=CH-.

Từ công thức phân tử $C_5H_4O_2$ kết hợp với các dữ kiện trên có thể giả thiết công thức cấu tạo của hợp chất là:



Phổ MS:

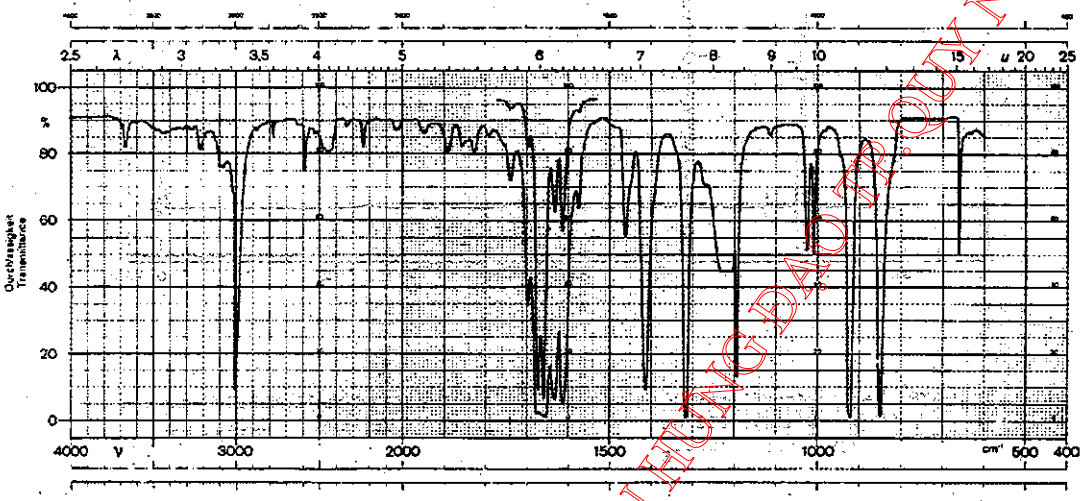


DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 10003 TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

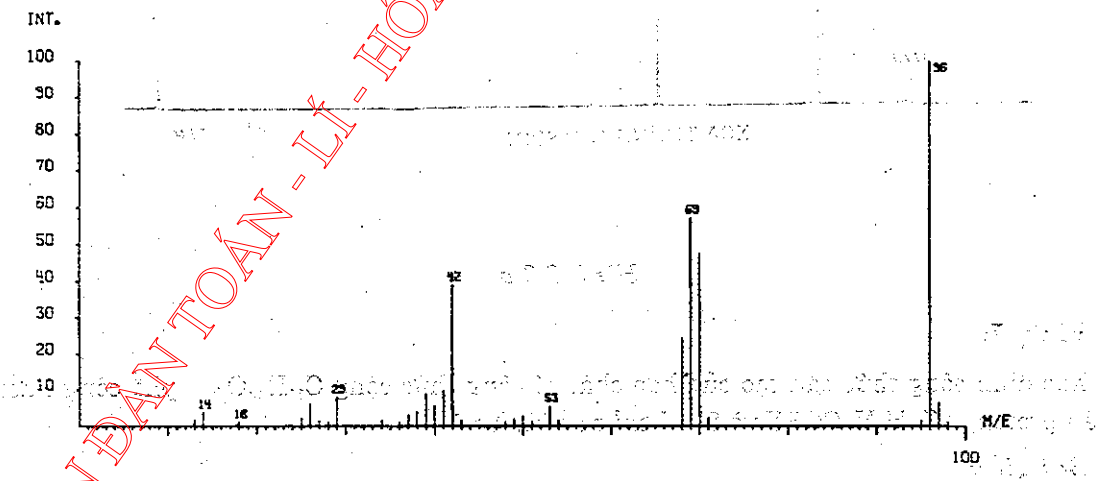
IR: Perkin-Elmer Modell 125
Ghi trong $CHCl_3$



MS: Hitachi Perkin-Elmer
Modell RMU-6M

$m^* \qquad m_1 \longrightarrow m_2 + (m_1 - m_2)$

48.1 96 68 28

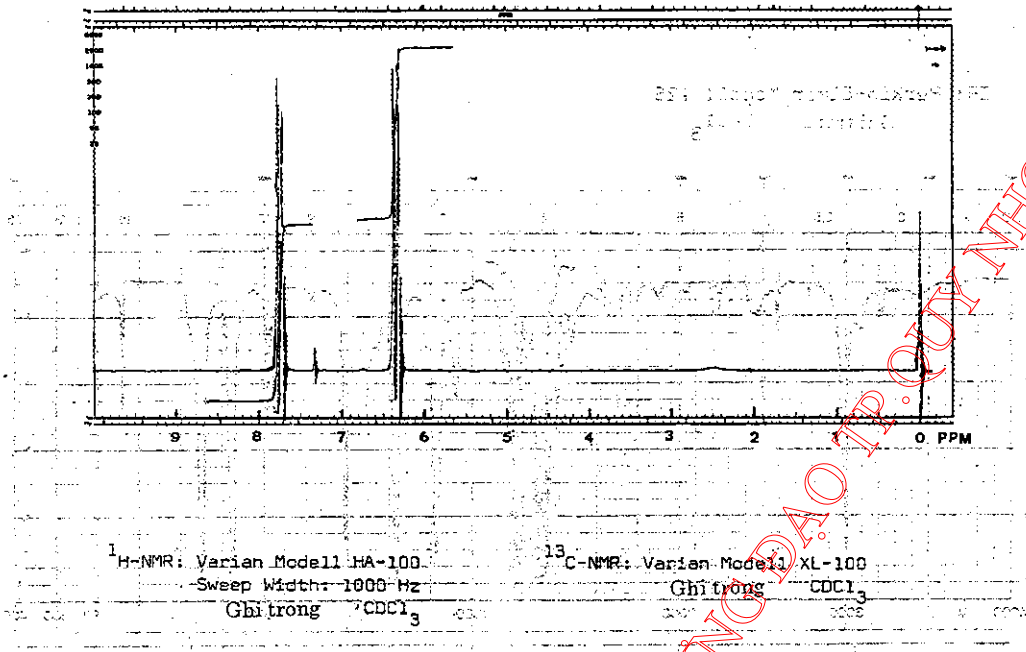


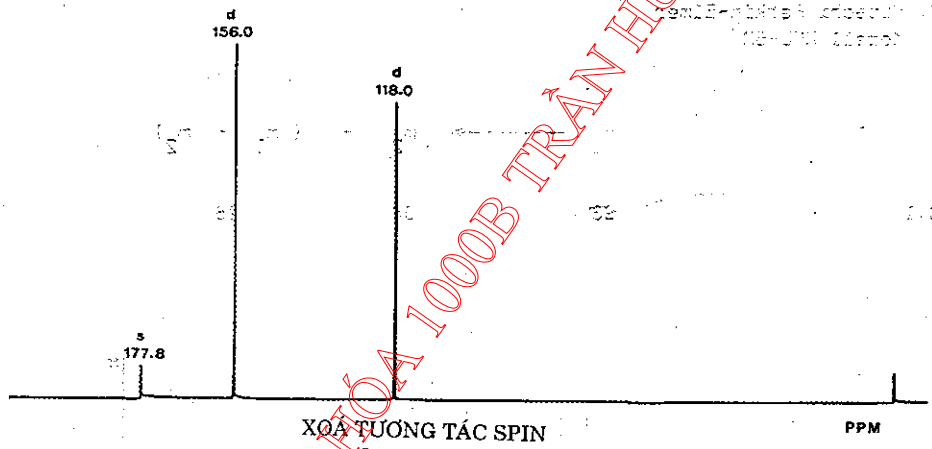
Hình 8.6 a

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM





Hình 8.6 b

Ví dụ 7:

Xác định công thức cấu tạo của hợp chất có công thức cộng $C_{11}H_{14}O$, phổ cộng hưởng từ nhân proton, ^{13}C, H,H-COSY và 2D-J chỉ ra ở hình 8.7.

Bài giải:

Phổ ^{1}H-NMR: Chỉ ra δ_a=0,9 ppm (3H), δ_b=6,4 ppm (2H), δ_c=1,7 ppm (2H), δ_d=4,3 ppm (2H), δ_e=7,3 ppm (2H), δ_f=7,4 ppm (2H) và δ_g=8,0 ppm (2H).

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

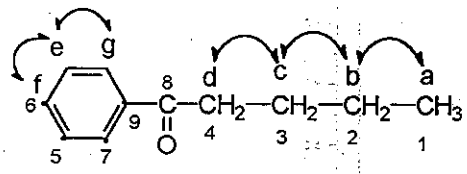
https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

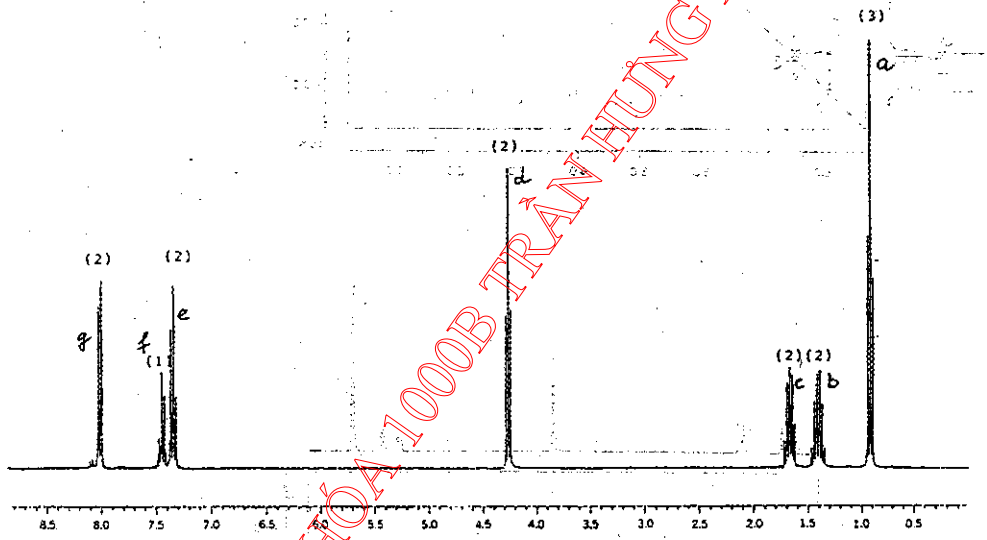
Phổ ^{13}C-NMR: Có δ_{C1}=13 ppm, δ_{C2}=20 ppm, δ_{C3}=30 ppm, δ_{C4}=64 ppm, δ_{C5}=123 ppm, δ_{C6}=130 ppm, δ_{C7}=132 ppm và δ_{C8}=166 ppm, δ_{C9}=131 ppm.

Phổ H,H-COSY: Chỉ ra các nhóm tương tác với nhau: a-b, b-c, c-d, e-f và e-g.

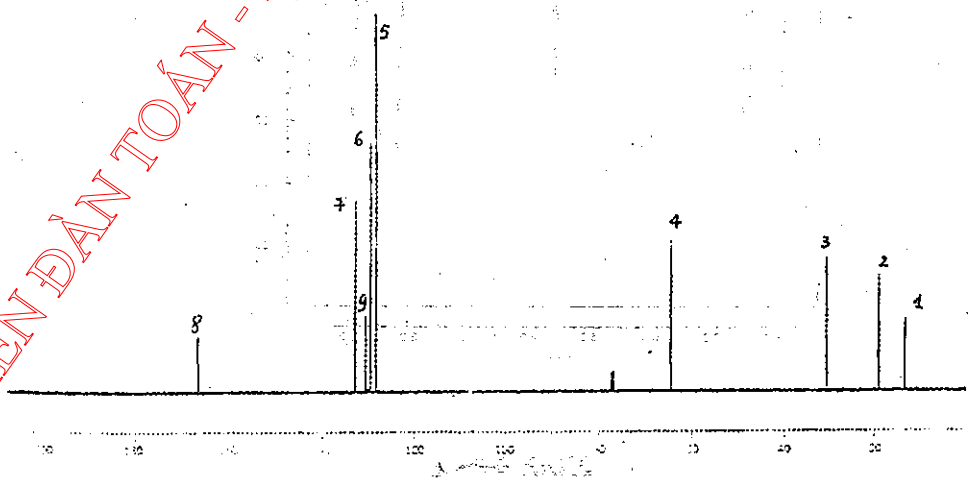
Phổ HOM 2D-J: Chỉ ra sự tương tác (hằng số J) của các nhóm proton.

Từ công thức phân tử $C_5H_4O_2$ kết hợp với các dữ kiện trên có thể giả thiết công thức cấu tạo của hợp chất là:





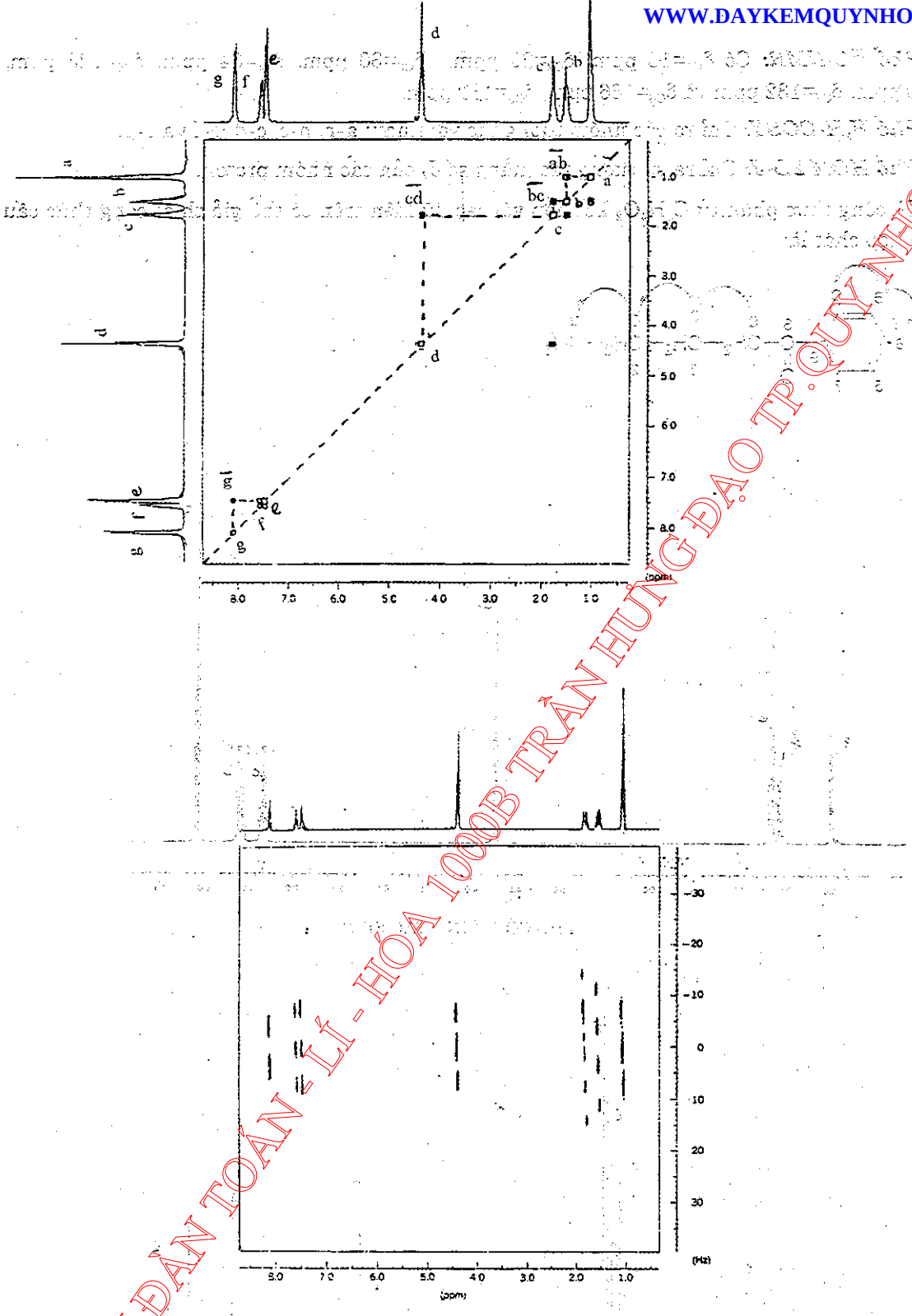
PHỔ CÓ TƯƠNG TÁC SPIN



DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM



Hình 8.7 b,c

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP.QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Chương 9

BÀI TẬP

Bài tập 1:

Xác định cấu tạo của hợp chất chứa C, H, O có khối lượng M=58 và phổ chỉ ra ở hình 9.1.

Bài tập 2:

Xác định cấu tạo của hợp chất chứa C, H và O, có khối lượng M=100 và phổ chỉ ra ở hình 9.2.

Bài tập 3:

Xác định cấu tạo của hợp chất chứa C, H và O, có khối lượng M=176 và phổ chỉ ra ở hình 9.3.

Bài tập 4:

Xác định cấu tạo của hợp chất chứa C, H va O, có phổ chỉ ra ở hình 9.4a,b.

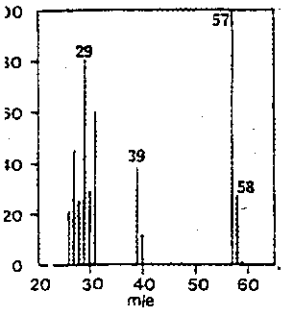
Bài tập 5:

Xác định cấu tạo của hợp chất chứa C, H, O và halogen có phổ chỉ ra ở hình 9.5a. b.

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 10000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP QUY NHƠN

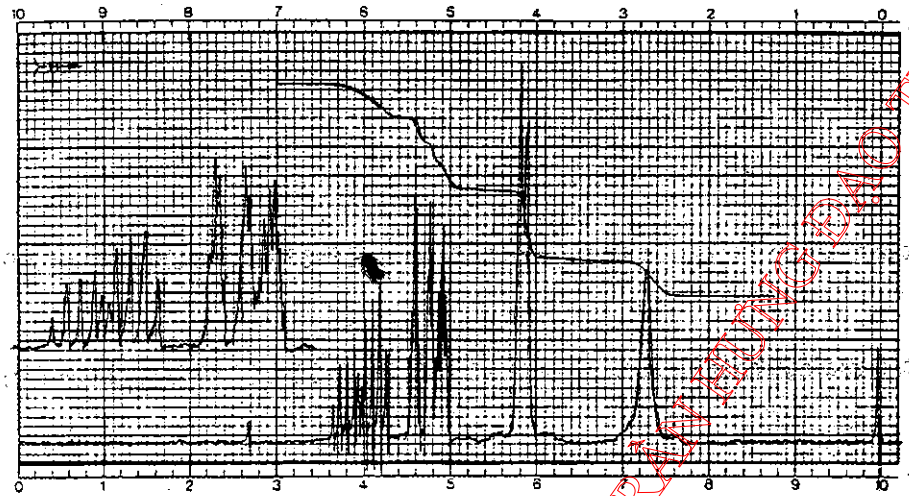
https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

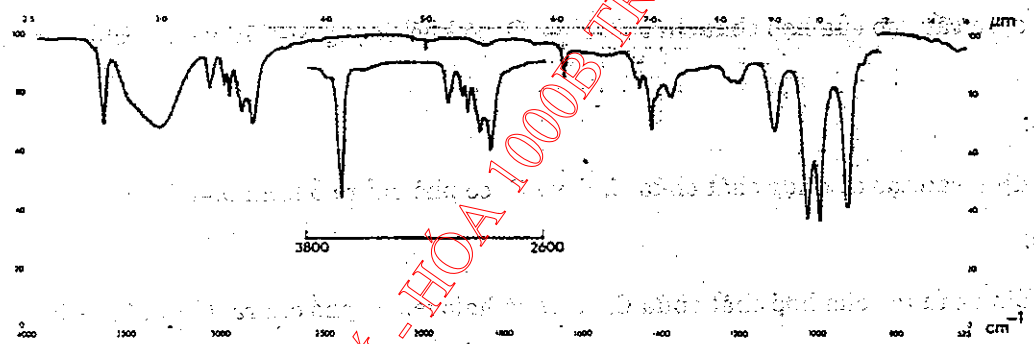
WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM



GHI CHÚ

Chất lỏng chứa C, H và O.
MS: M⁺ 58.
UV: Không hấp thụ





Số sóng

ĐIỀU KIỆN GHI

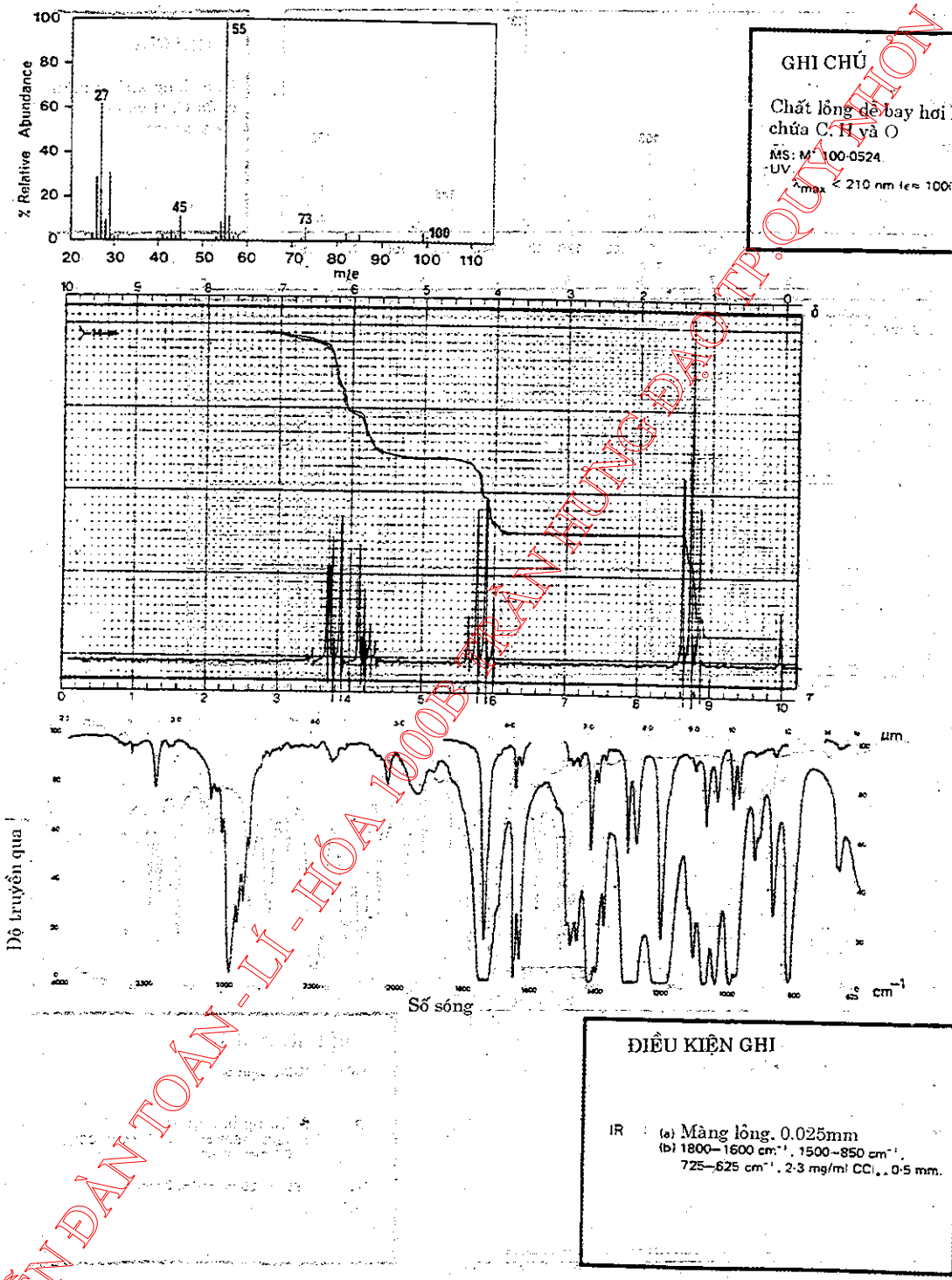
NMR: Dung môi $CDCl_3$

IR : (a) 4000—850 cm⁻¹, 21·1 mg/ml CCl_4; 850—625 cm⁻¹, 19·6 mg/ml CS_2; 0·1 mm.
(b) 1 in 50 dilution, 3800—2600 cm⁻¹, 5 mm, offset.

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN PHÚ QUY NHƠN

Hình 9.1

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

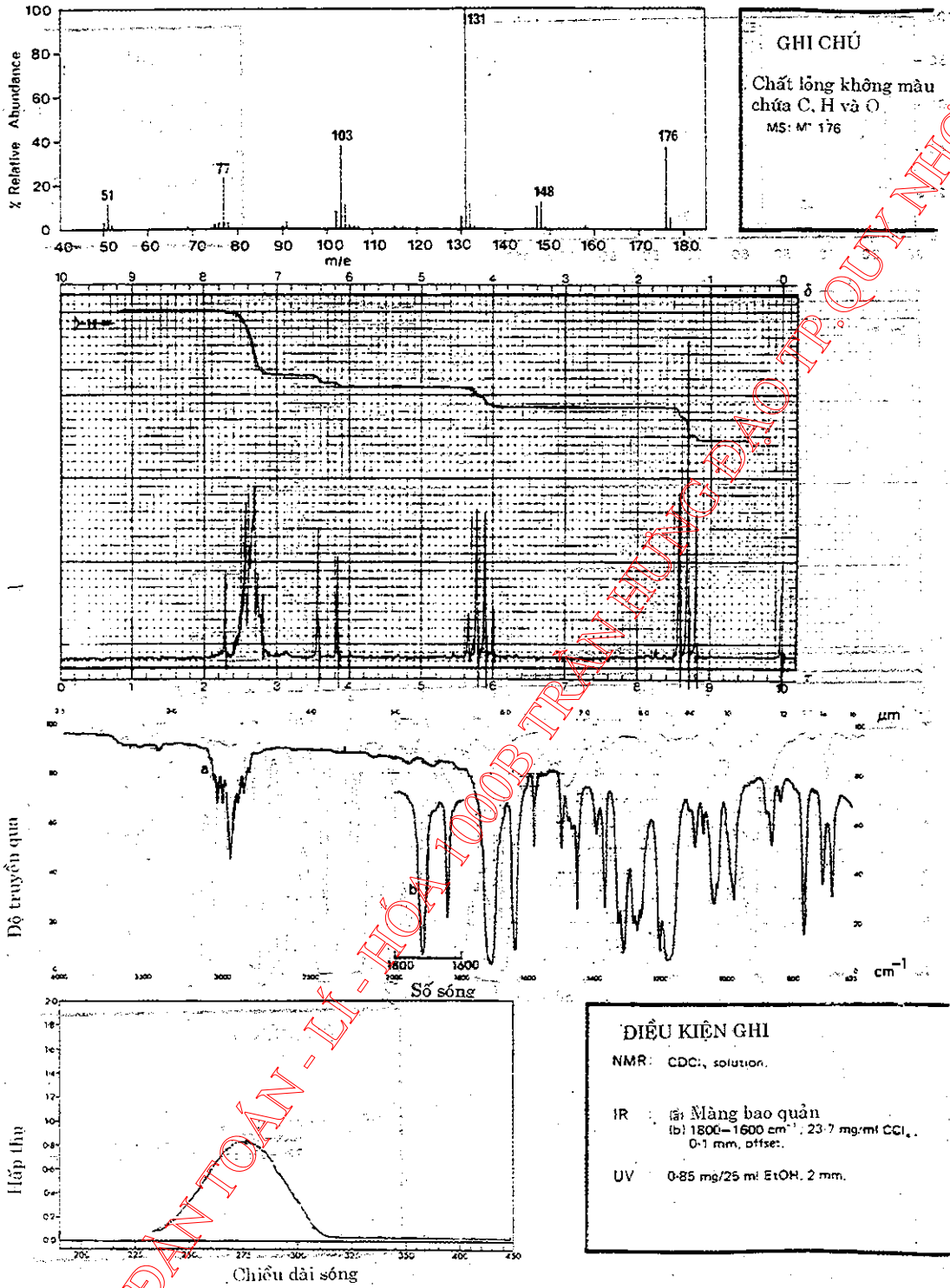


Hình 9.2

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 10000 THÀNH VIÊN ĐẦU TIÊN TẠI TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

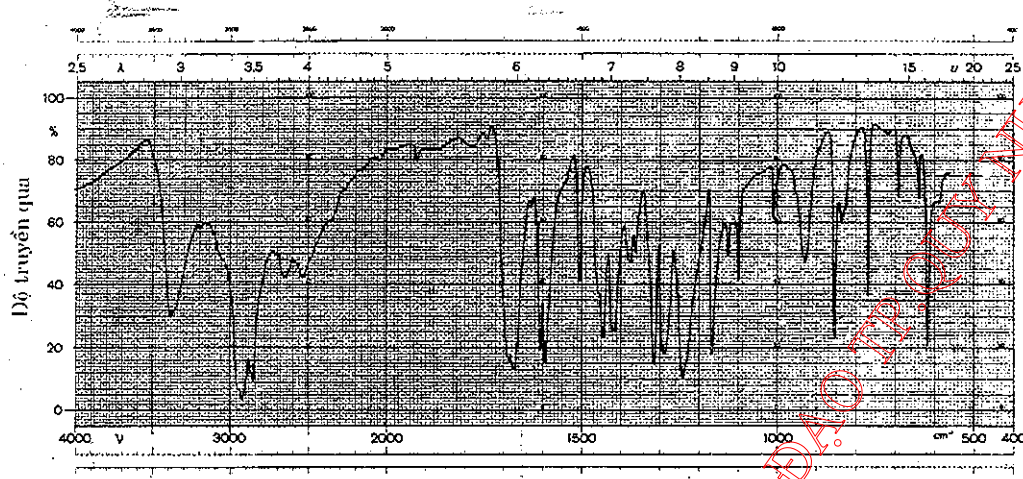


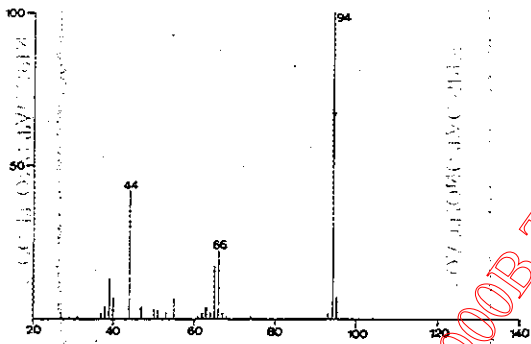
Hình 9.3

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM





IR : Perkin-Elmer Modell 125
Ghi trong Nujol

NMR : Varian Modell A-60A
Ghi trong CD_3COCD_3

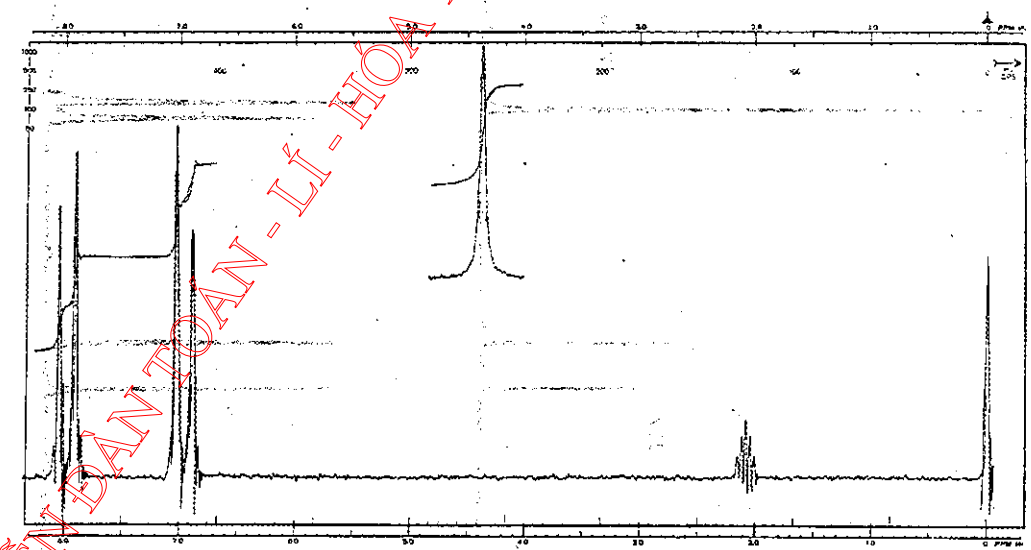
MS: Hitachi Perkin-Elmer RMU-6A

UV : Lit.
Ghi trong 0,1N HCl

λ_{max}[nm]	log ε
255	4,14

Ghi trong 0,1N NaOH

λ_{max}[nm]	log ε
280	4,21

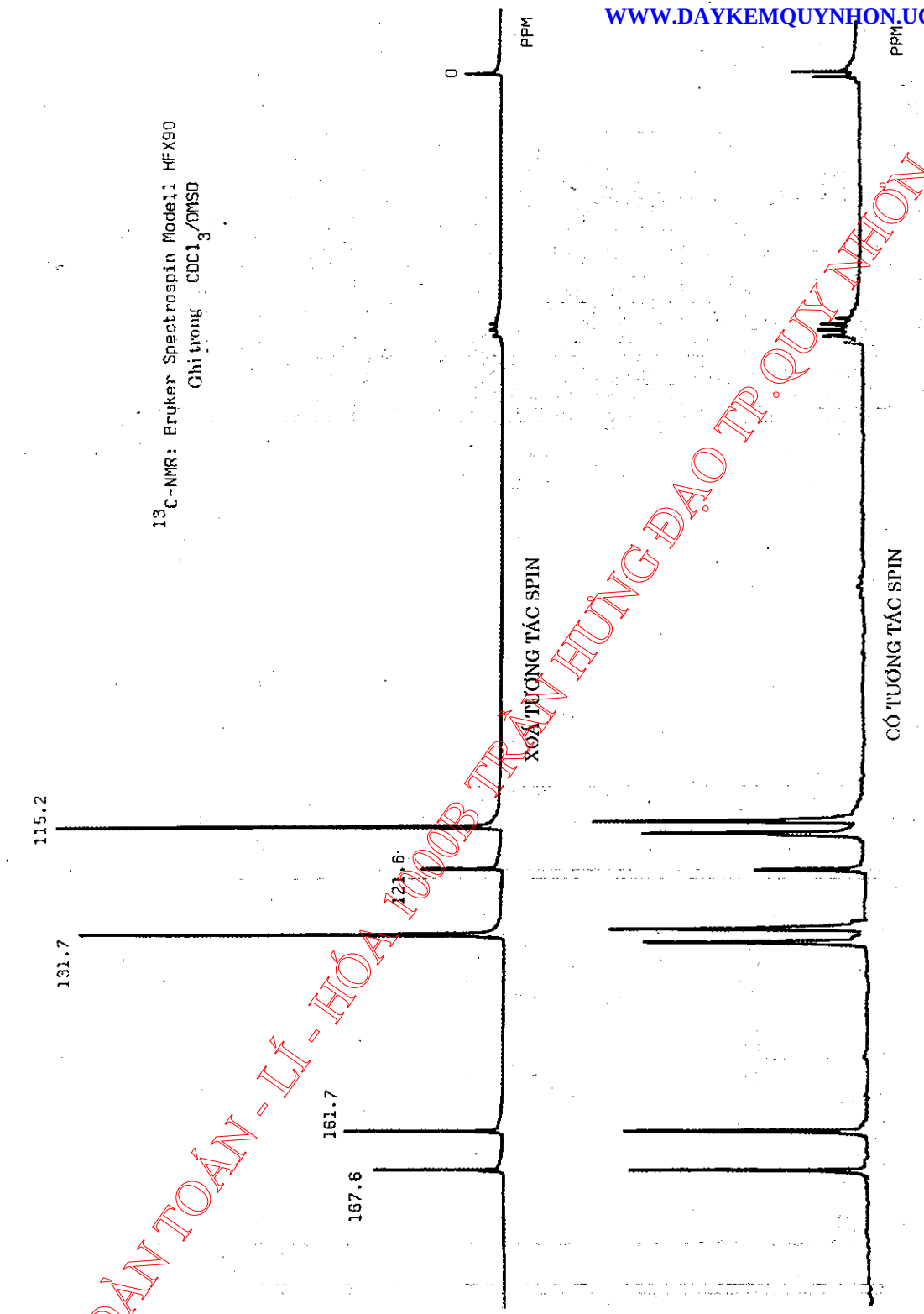


DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP QUY NHƠN

Hình 9.4 a

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

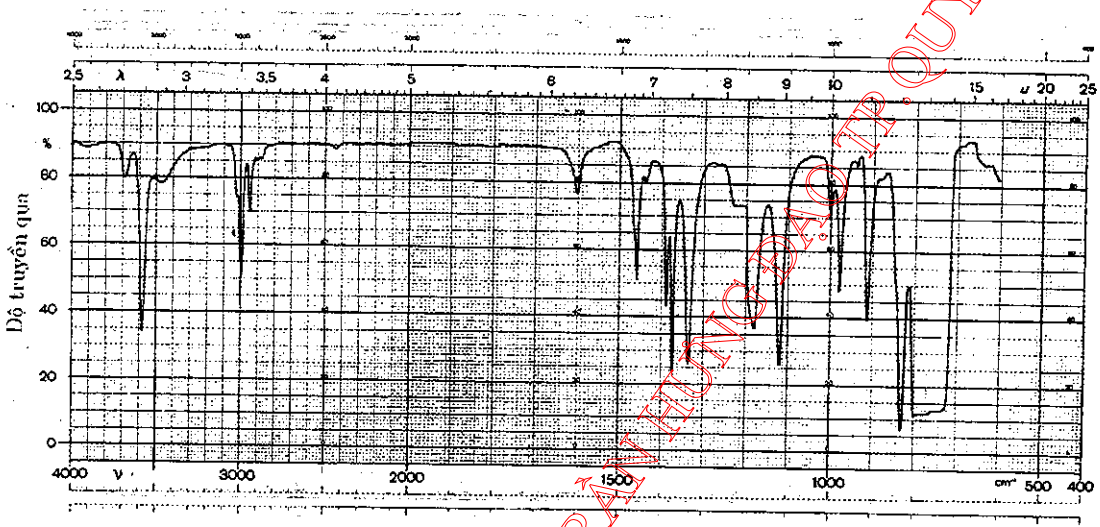


Hình 9.4 b

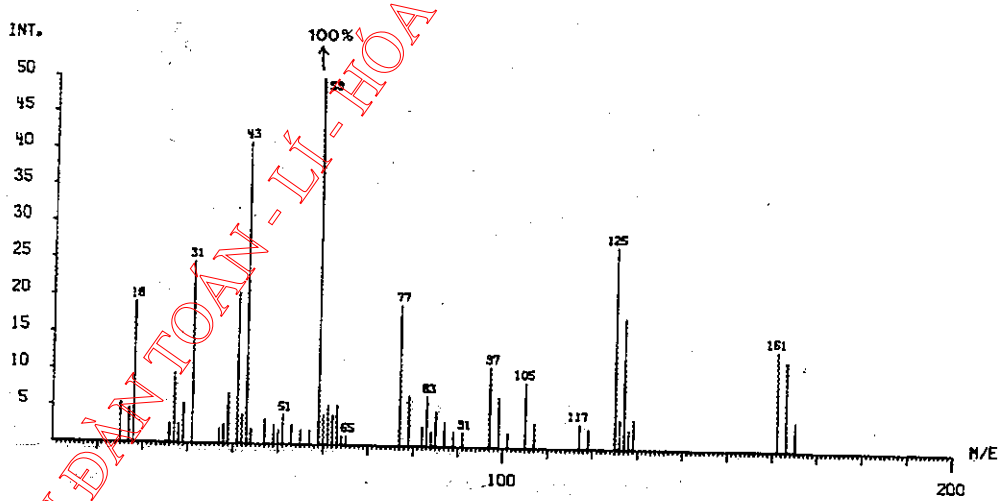
DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

IR: Perkin-Elmer Modell 125
Ghi trong $CHCl_3$



MS: Hitachi Perkin-Elmer
Modell RMU-6M



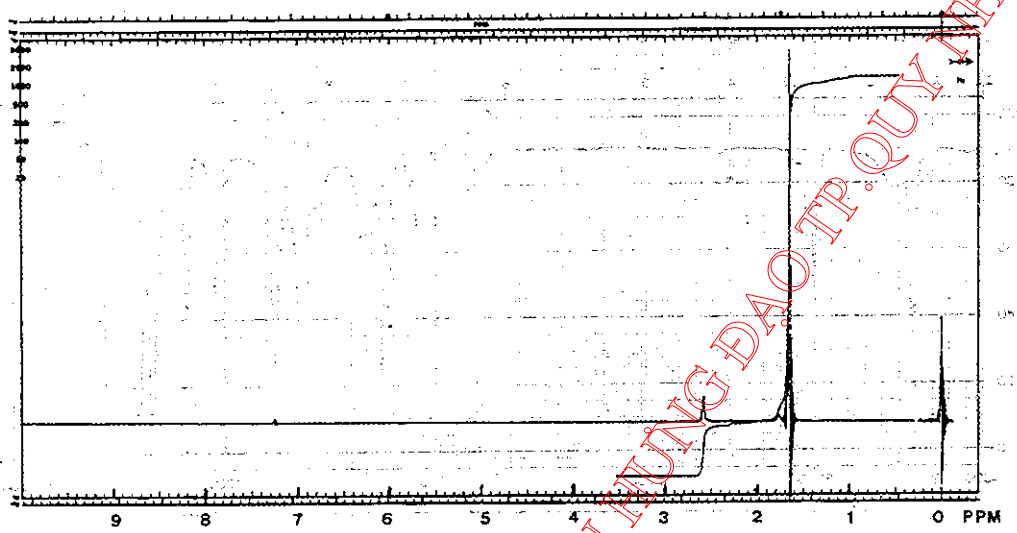
Hình 9.5 a

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

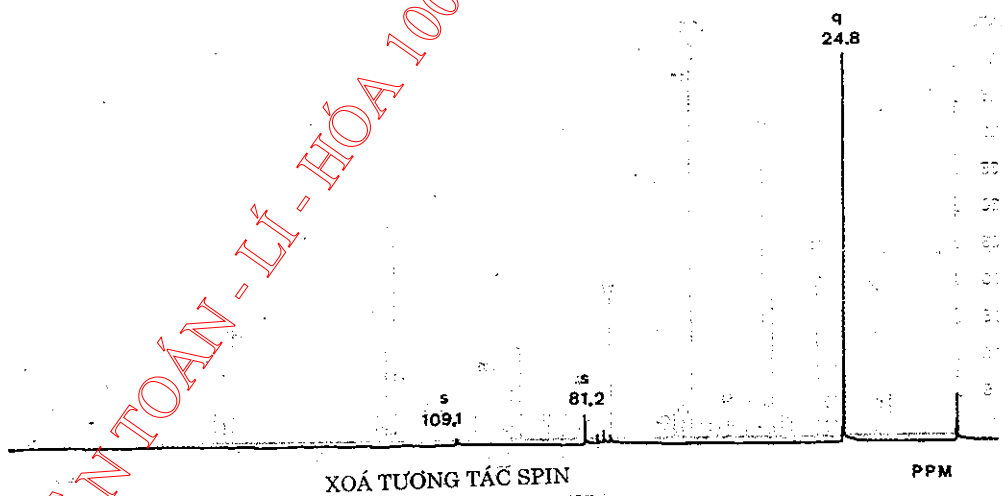
https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

^{1}H-NMR:Varian Modell HA-100
Sweep Width: 1000 Hz
Ghi trong $CDCl_3$



^{13}C-NMR: Varian Modell XL-100
Ghi trong $CDCl_3$



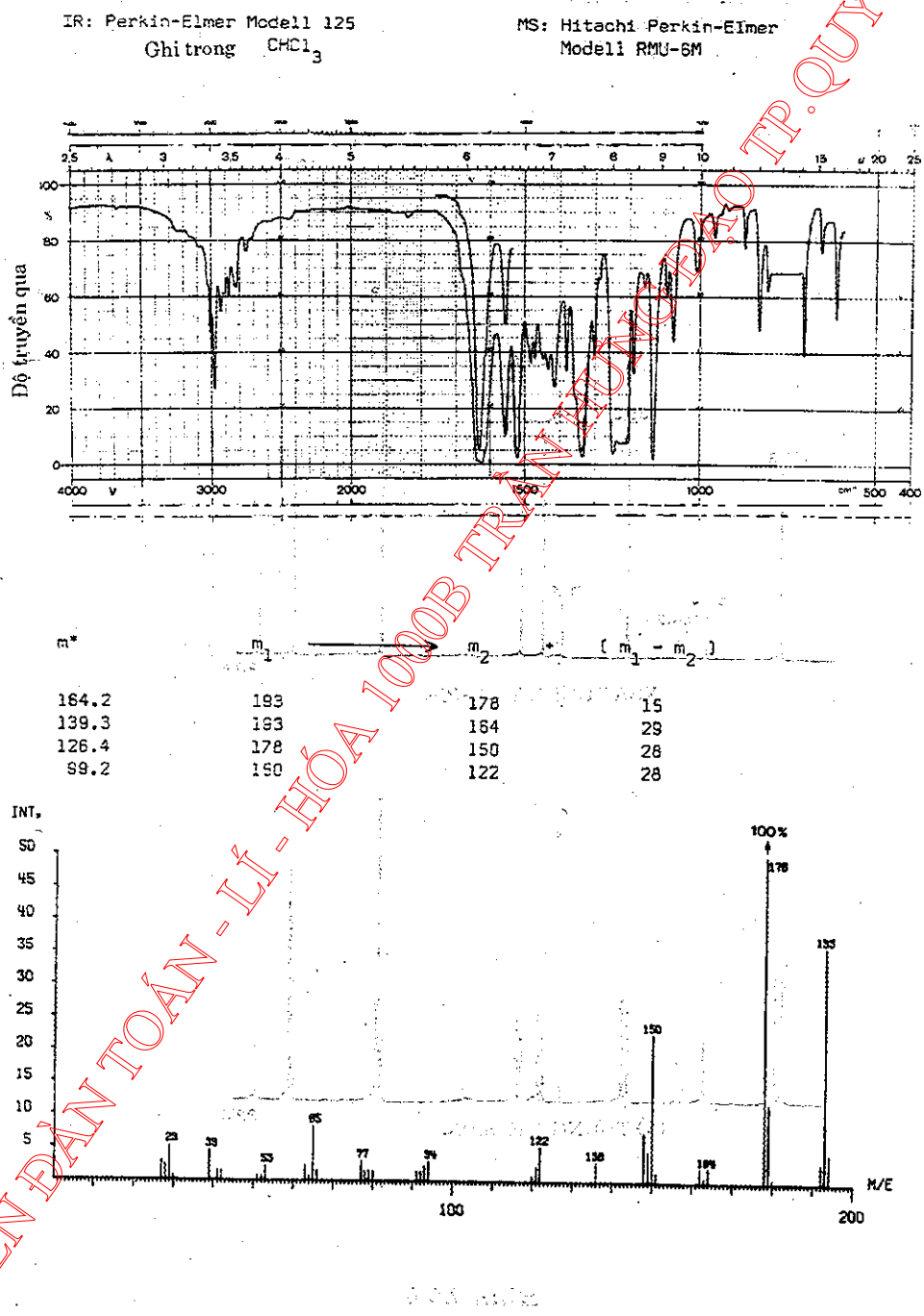
Hình 9.5 b

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

Bài tập 6:

Xác định cấu tạo của hợp chất chứa C, H và O có phổ chỉ ra ở hình 9.6 a, b, c.

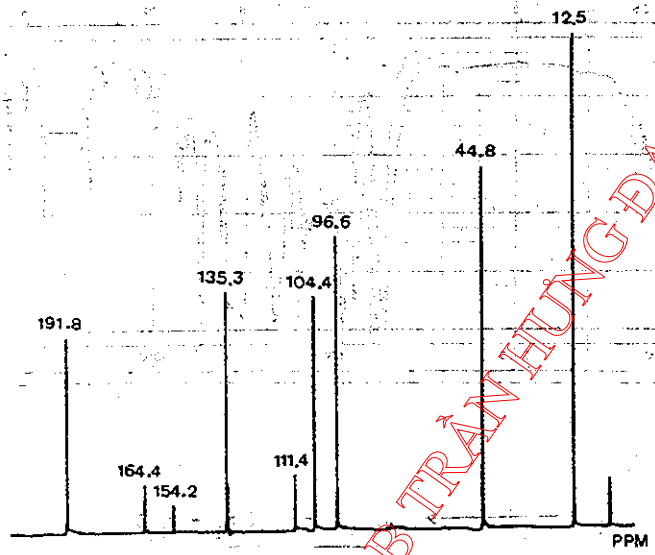


Hình 9.6 a

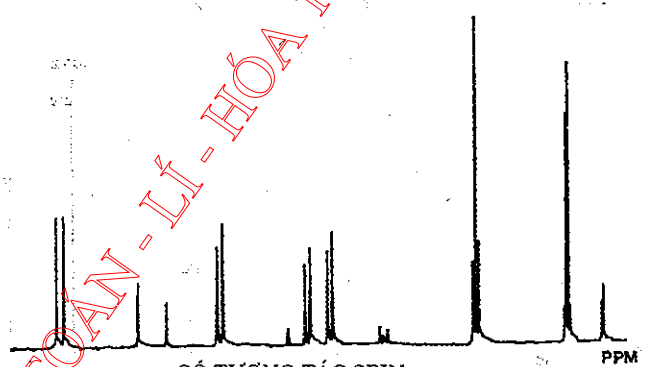
DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

^{13}C-NMR: Bruker Spectrospin
Modell HFX-90
Ghi trong $CDCl_3$



XOÁ TƯƠNG TÁC SPIN



CÓ TƯƠNG TÁC SPIN

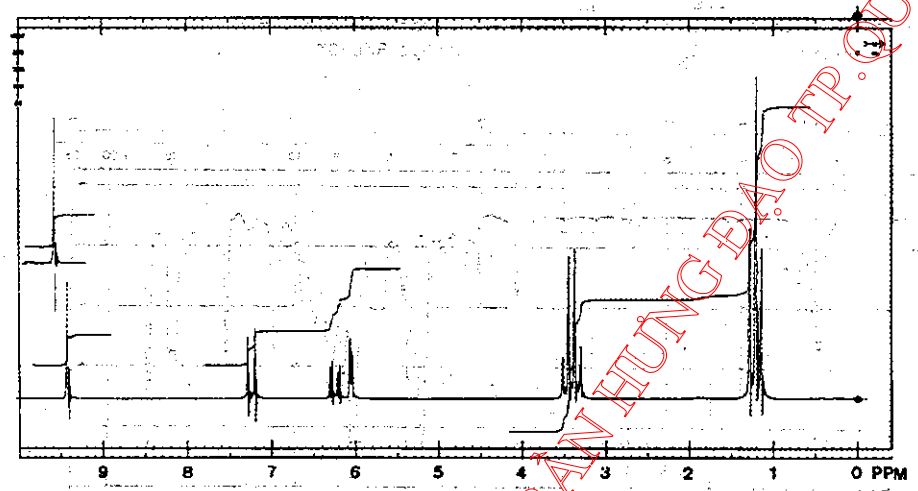
Hình 9.6 b

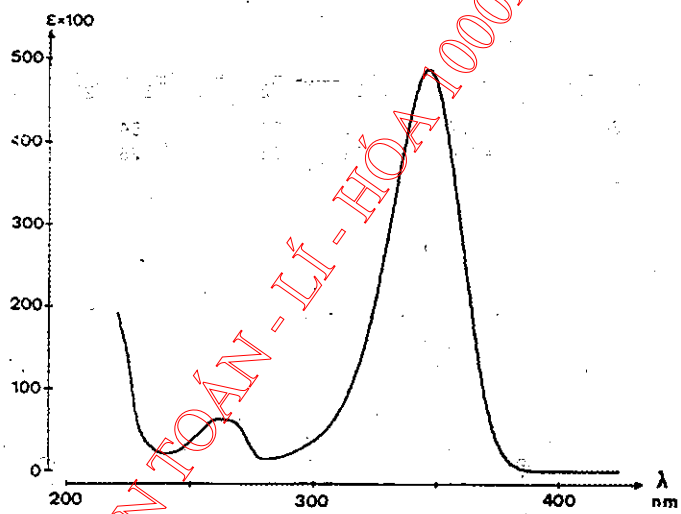
DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 10000 TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

^{1}H-NMR: Varian Modell HA-100
Sweep Width: 1000 Hz
Sweep Offset: 200 Hz
Ghi trong $CDCl_3$





UV: Cary Modell 14
Ghi trong EtOH

Hình 9.6 c

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org

Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

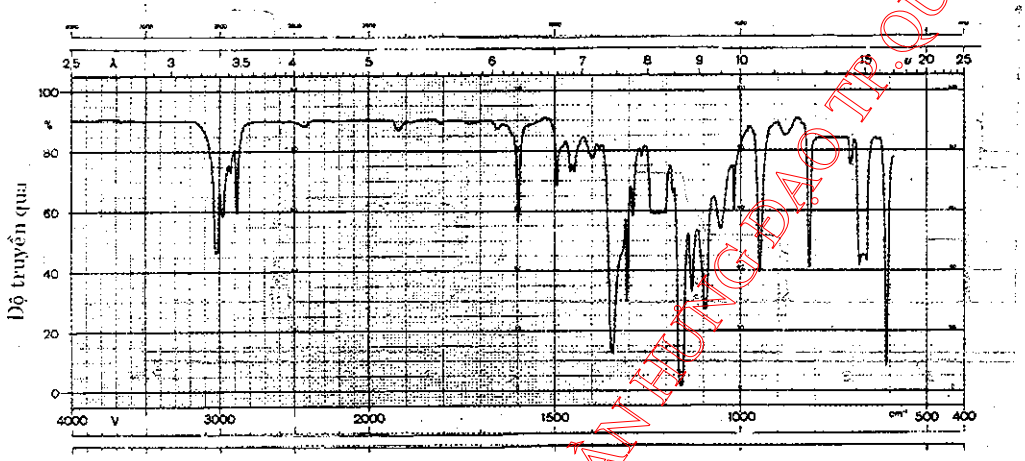
Xác định cấu tạo của hợp chất chứa C, H, N và S, có khối lượng M=211 và phổ chỉ ra ở hình 9.7a,b.

UV : Perkin-Elmer Modell 555
Ghi trong C_2H_5OH

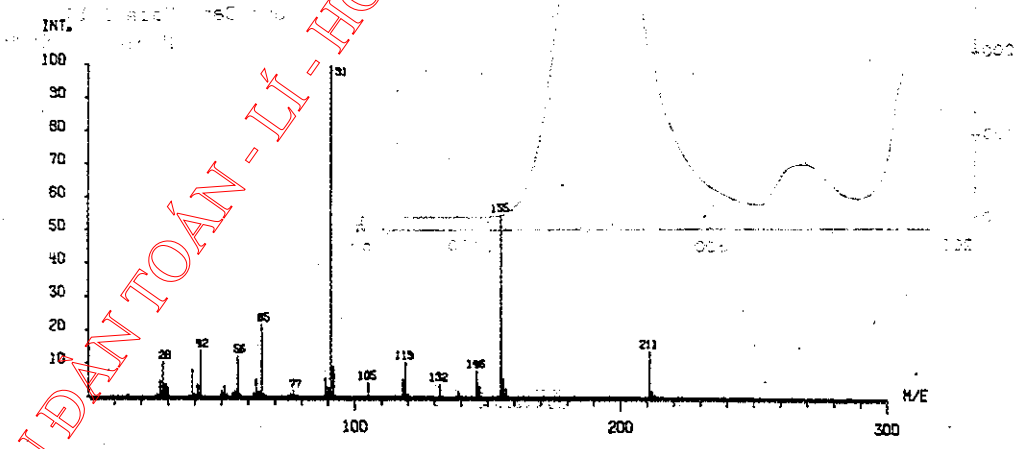
λ_{max} (nm)	ε
228	12600
260	740
266	600
272	450

IR: Perkin-Elmer Modell 125 — Ghi trong $CHCl_3$

MS: Hitachi-Perkin-Elmer Modell RMU-6M



m*	$m_1 \rightarrow m_2$ +	$(m_1 - m_2)$	m*	$m_1 \rightarrow m_2$ +	$(m_1 - m_2)$
102.4	211 147	64	53.4	155 91	64
181.0	211 146	65	46.4	91 65	26
96.3	147 119	28			



Hình 9.7a

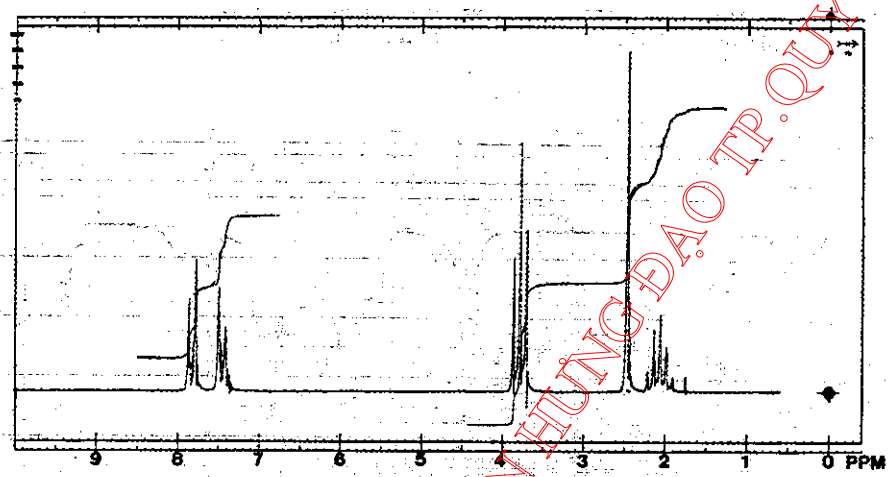
DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP QUY NHƠN

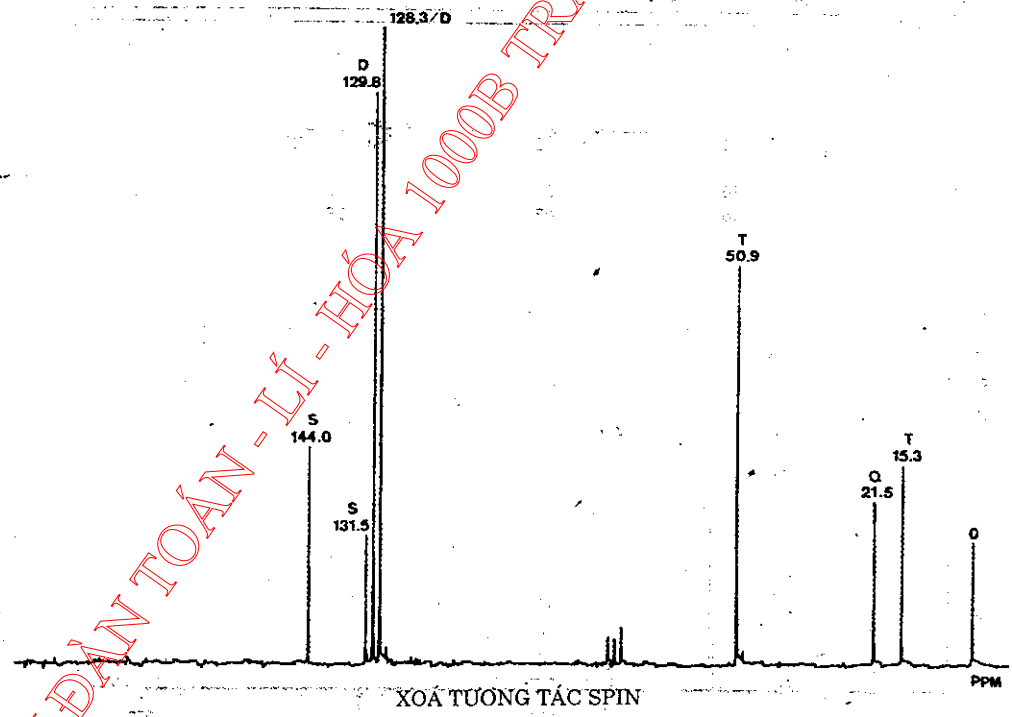
https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

^{1}H-NMR: Varian Modell HA-100 (100 MHz)
Sweep Width: 1000 Hz
Ghi trong $CDCl_3$

^{13}C-NMR: Bruker Spectrospin
Modell HFX-90 (22.6 MHz)
Ghi trong $CDCl_3$





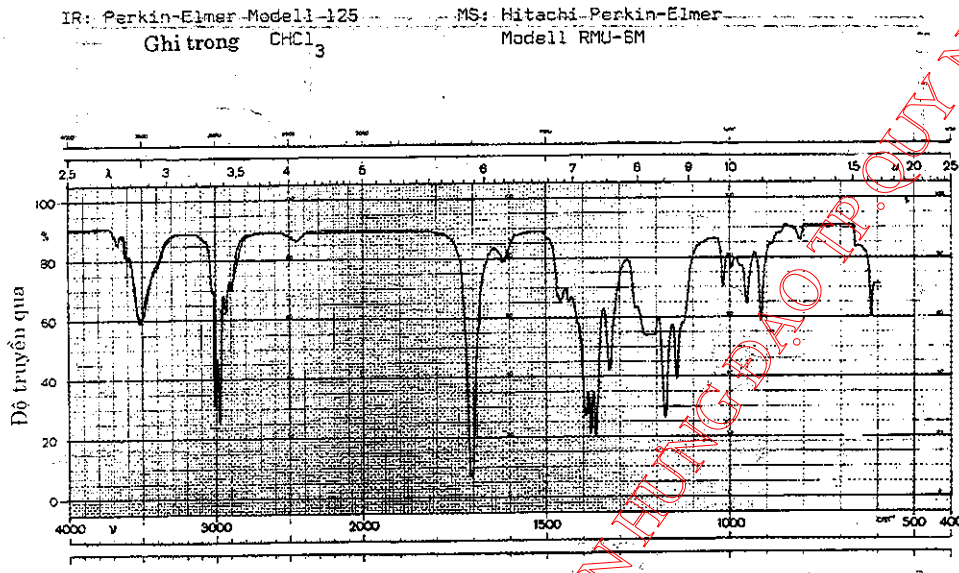
XOÁ TƯƠNG TÁC SPIN

Hình 9.7 b

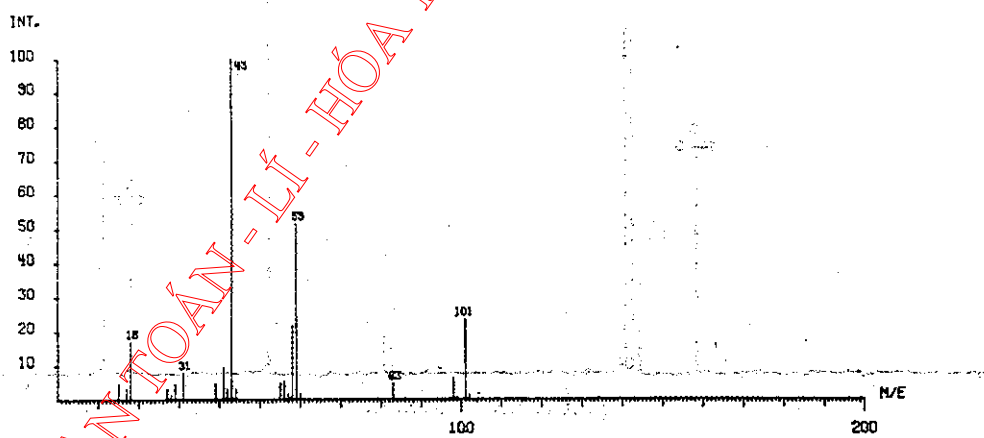
DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

Xác định cấu tạo của hợp chất chứa C, H, O, có phổ chỉ ra ở hình 9.8 a, b, c.



m^*	m_1	$\longrightarrow$	m_2	$(m_1 - m_2)$
70.3	86		43	15
31.9	58		43	15

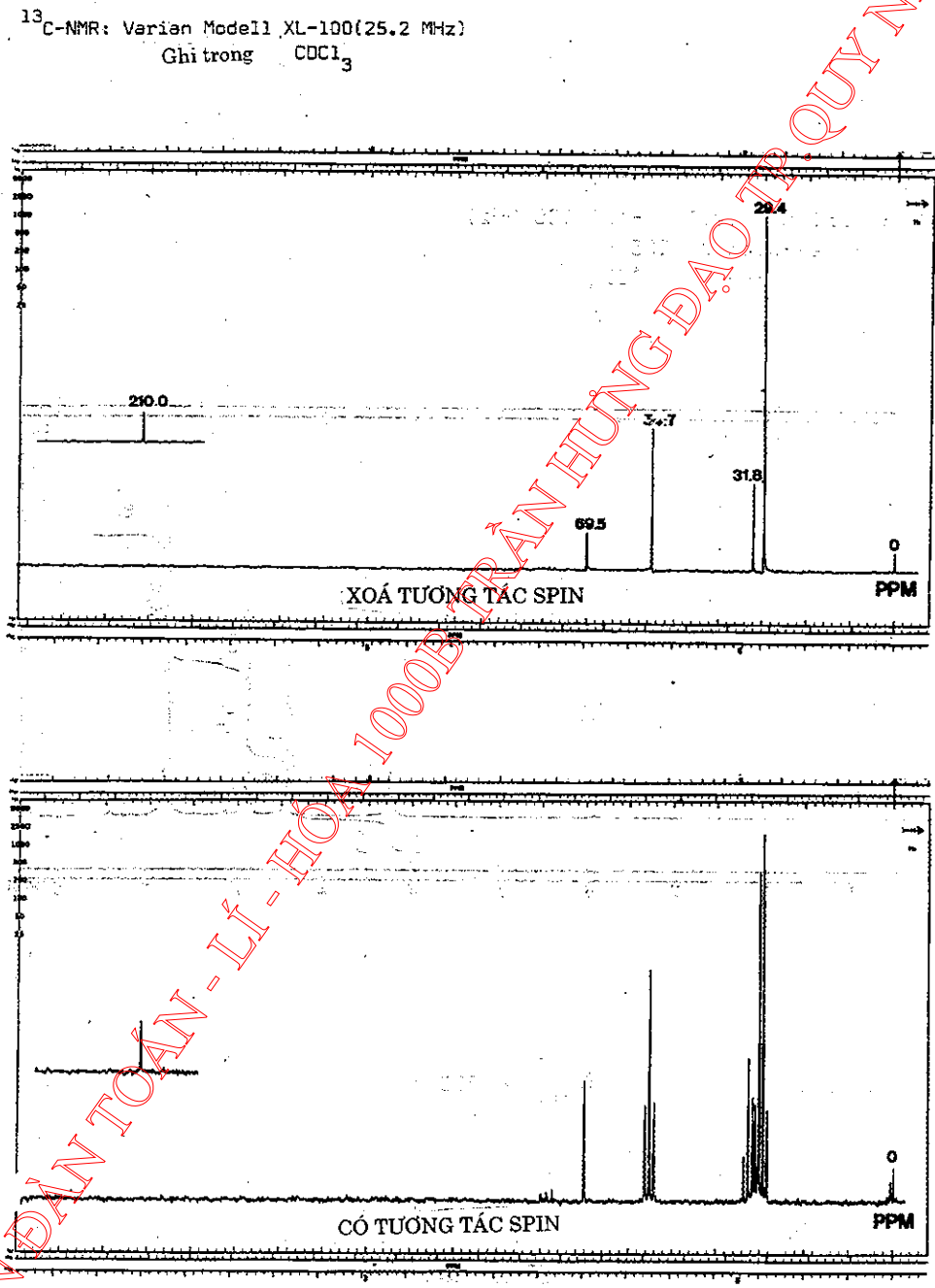


Hình 9.8 a

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM



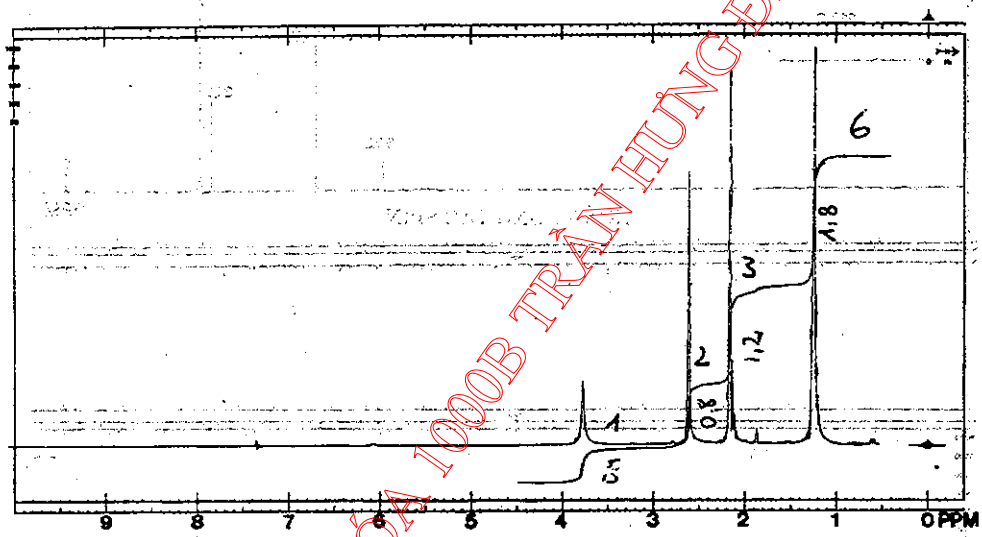
Hình 9.8 b

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

^{1}H-NMR: Varian Modell HA-100(100 MHz)
Sweep-Width: 1000 Hz
Ghi trong $CDCl_3$



UV: Không hấp thu ở λ_{max} > 220 nm.

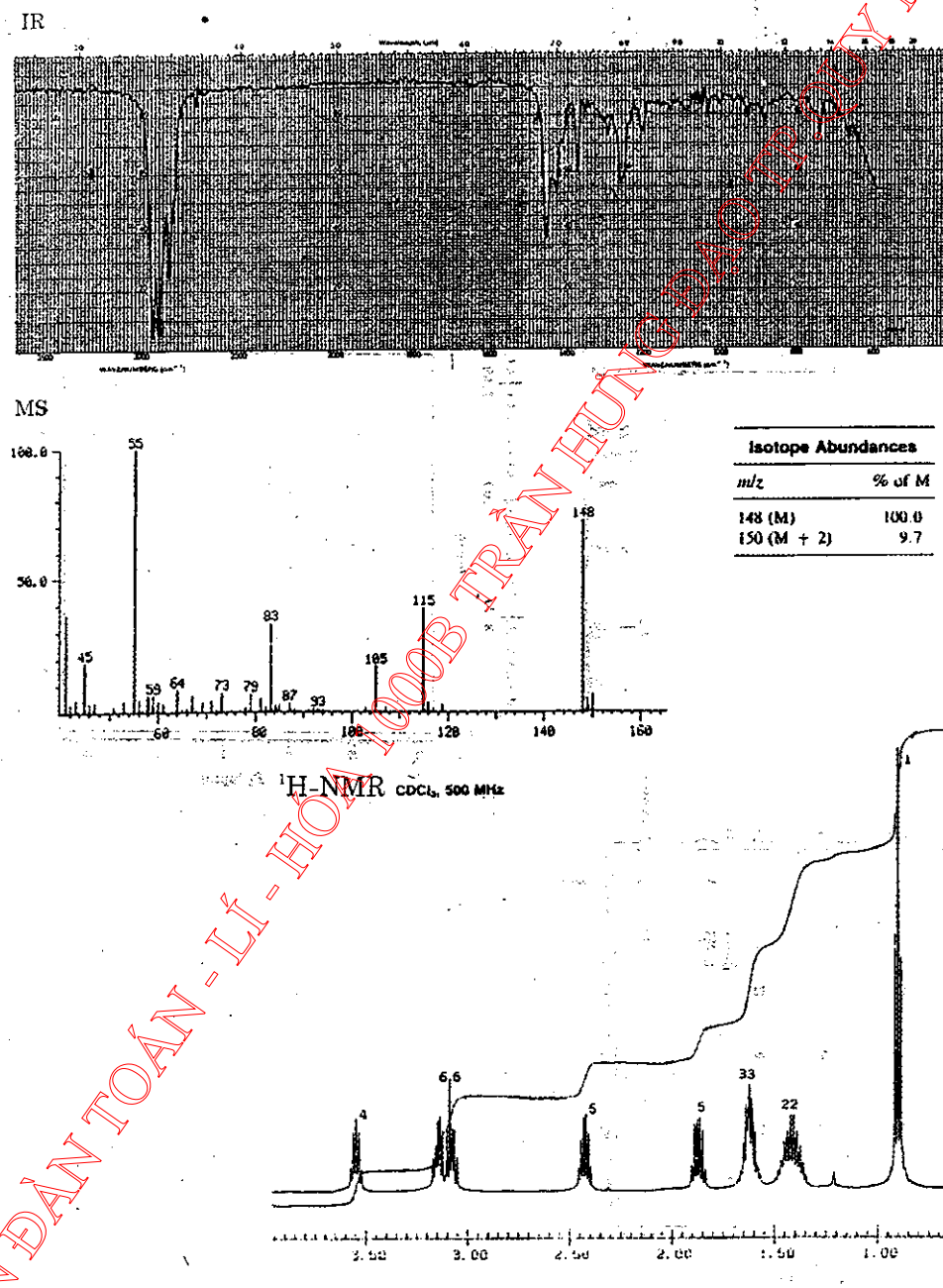
Hình 9.8 c

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

Bài tập 9:

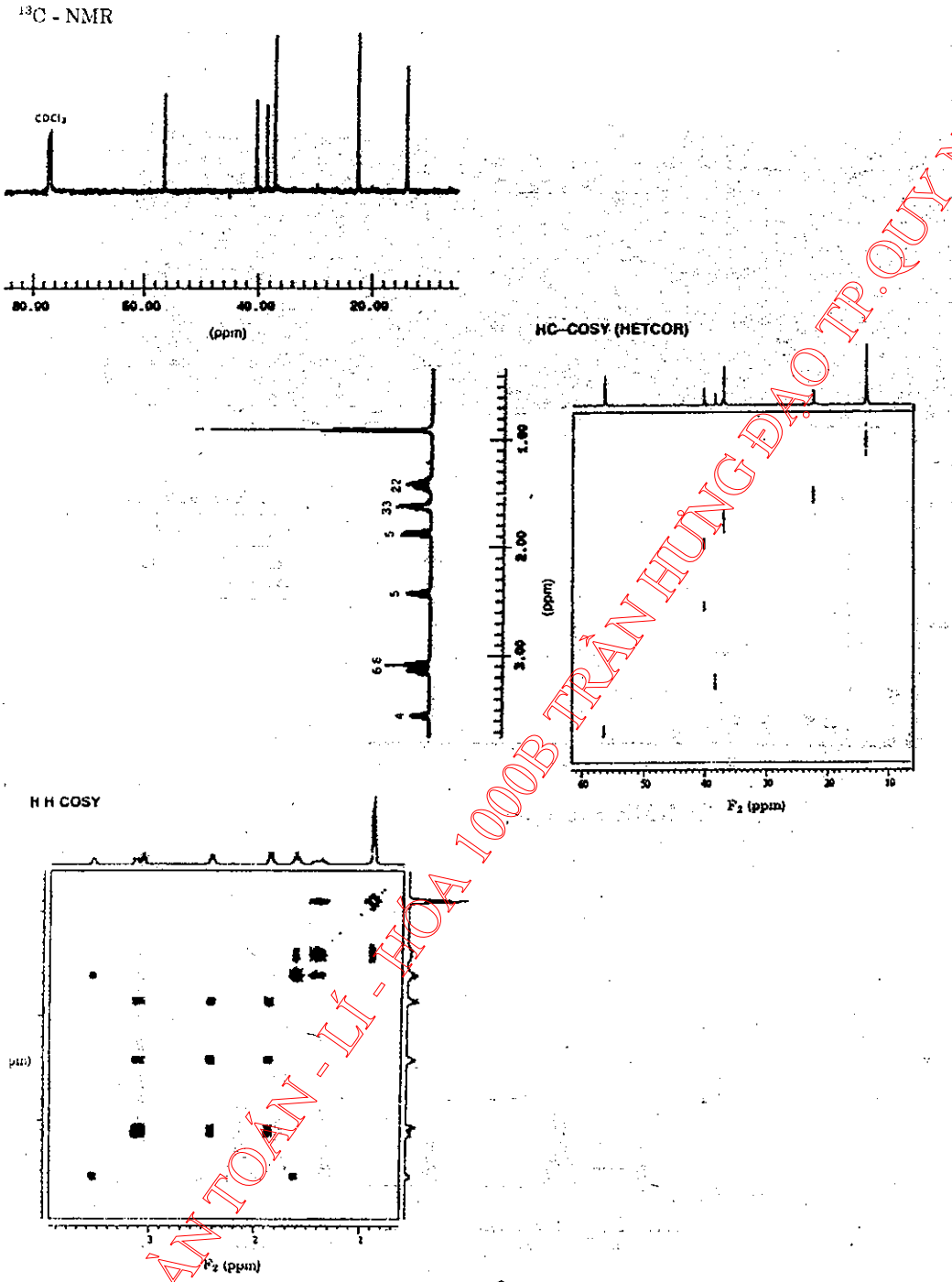
Xác định cấu tạo của hợp chất chứa C,H và O, có khối lượng M=148 và phổ chỉ ra ở hình 9.9 a,b.



Hình 9.9 a

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP QUY NHƠN

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM



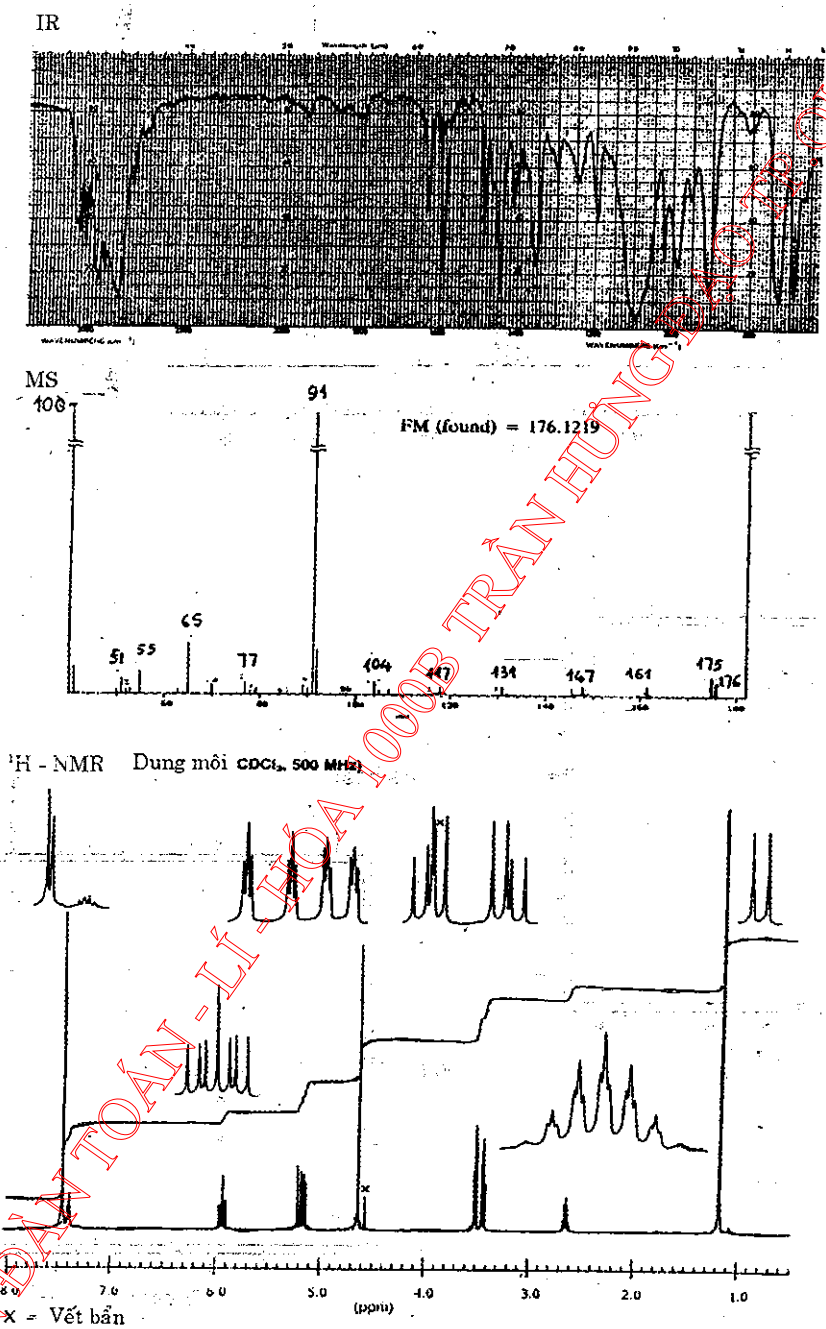
Hình 9.9 b

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

Bài tập 10:

Xác định cấu tạo của hợp chất chứa C, H và O, có khối lượng M=176 và phổ chỉ ra ở hình 9.10 a, b.



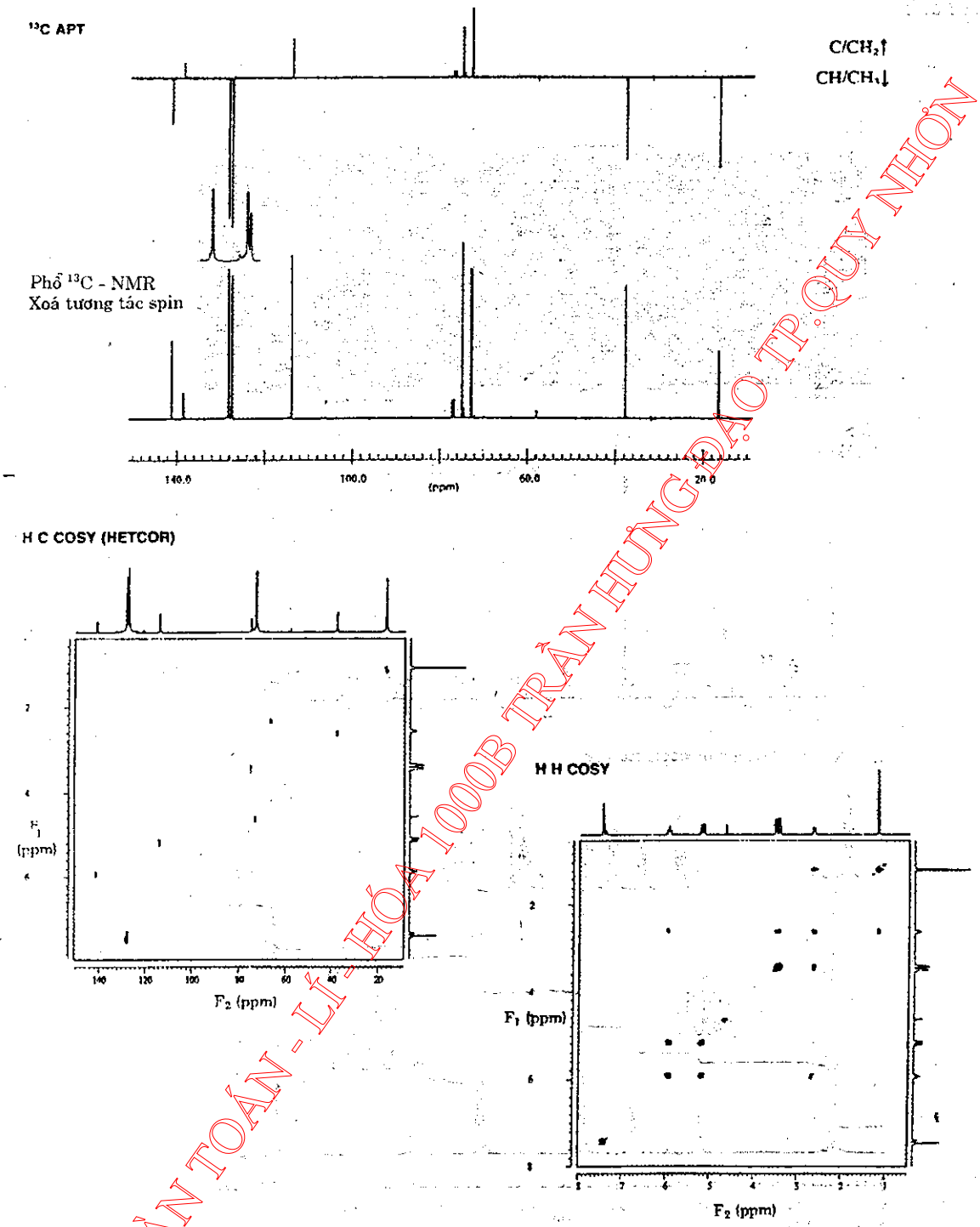
Hình 9.10 a

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org

Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM



Hình 9.10 b

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

Bài tập 11:

a) Khoảng cách trung bình giữa hai vạch liên tiếp trong phổ quay của HCl bằng 20,8cm^{-1}. Tính momen quay và khoảng cách giữa các hạt nhân nguyên tử của HCl (tính theo đơn vị CGS và SI).

b) Ba mức quay đầu tiên của phân tử CO có năng lượng $0,76.10^{-23}$ và $22,9.10^{-23}$ J/mol. Hỏi chiều dài sóng của bức xạ là bao nhiêu để kích thích phân tử CO quay từ mức E_1 lên E_2?

Bài tập 12:

a) Tần số dao động cơ bản của HCl là $8,67.10^{13}$ Hz. Tính hằng số lực của phân tử.

b) Hằng số lực của liên kết C-H là 5,0 N/cm, khối lượng của nguyên tử cacbon là 20.10^{-24}g và của nguyên tử hidro là $1,6.10^{-24}$g. Tính tần số dao động của liên kết C-H.

($1N=1kgm/s^2=1.10^5gcm/s^2$)

Bài tập 13:

Tính tần số cộng hưởng của ^1H, ^{13}C và ^{19}F trong từ trường ngoài có cường độ 7,04637 T và 11,7440 T.

$\gamma(^1H)=2,6752.10^8 T^{-1}s^{-1}$

$\gamma(^1C)=0,6726.10^8 T^{-1}s^{-1}$

$\gamma(^{19}F)=2,5167.10^8 T^{-1}s^{-1}$

Bài tập 14:

Xác định công thức cấu tạo của một dẫn xuất benzen thế 2 lần có công thức cộng $C_7H_4F_4$ và momen lưỡng cực bằng 2,19D.

Bài tập 15:

Xác định công thức cấu tạo của dibromanilin có momen lưỡng cực bằng 3,04D.

Bài tập 16:

Tính tỉ lệ cấu hình s-*cis* và s-*trans* của 4-brom-2-axetylnaphtalen có momen lưỡng cực bằng 1,8D.

Bài tập 17:

Tính tỉ lệ cấu hình s-*cis* và s-*trans* của *meta*-cloaxetylbenzen có momen lưỡng cực bằng 2,78D.

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org

Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú

Bài tập 18:

Hãy xác định sự tự quay tự do của nhóm $(CH_3)_2N$- và CH_3O- trong N,N-đimetyl-*para*-anisidin có momen lưỡng cực bằng 1,7D.

Bài tập 19:

Có bao nhiêu liên kết đôi trong phân tử hidrocacbon C_6H_{10}, có d=0,8081 và n_D^{22}=1,4451?

Bài tập 20:

Hợp chất $C_3H_6O_2$ có cấu tạo nào nếu nó có n_D^{20}=1,3598 và d_4^{20}=0,9168.

Bài tập 21:

Tính chiều dài sóng λ_{min} của ống phát tia X vận hành ở thế: a) 50KV; b) 80KV.

Bài tập 22:

Chiều dài sóng λ_{min} để kích thích electron mức K của ziconin (Zr) là 0,70Å. Tính thế tối thiểu để kích thích electron K trong ống tia X với bia ziconin.

Bài tập 23:

Phổ nhiễu xạ tia X của chì thu được có vạch K_α của đồng tương ứng λ=1,939Å. Tính giá trị d, khoảng cách giữa các mặt mạng tinh thể đối với đường bậc nhất ở sinθ=0,9210.

Bài tập 24:

Tính góc 2θ quan sát được đường K_{α_1} đối với Fe (1,76Å), Se (0,992Å) và Ag (0,497Å) khi sử dụng tinh thể phân tích a) topaz, b) LiF, c) NaCl.

Bài tập 25:

Vạch K_{α_1} của các nguyên tố Ca, Zn, Zr và Sn là 3,36; 1,44; 0,79 và 0,49Å. Tính giá trị gần đúng vạch K_{α_1} của các nguyên tố sau: V, Ni, Se, Br, Cd và Sb.

Bài tập 26:

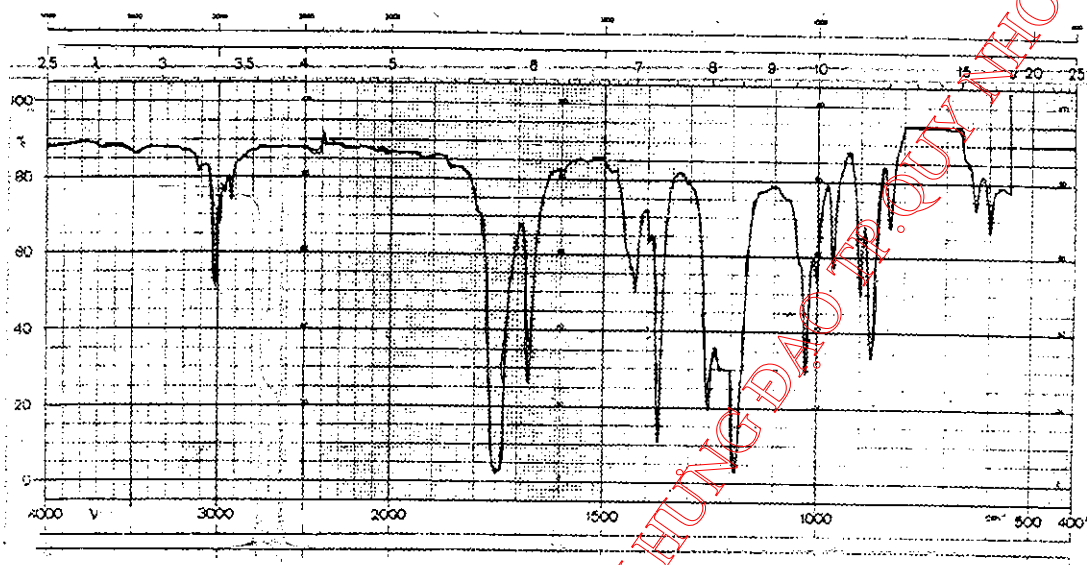
Xác định công thức cấu tạo của chất có phổ ở hình 9:11 a, b, c, e.

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

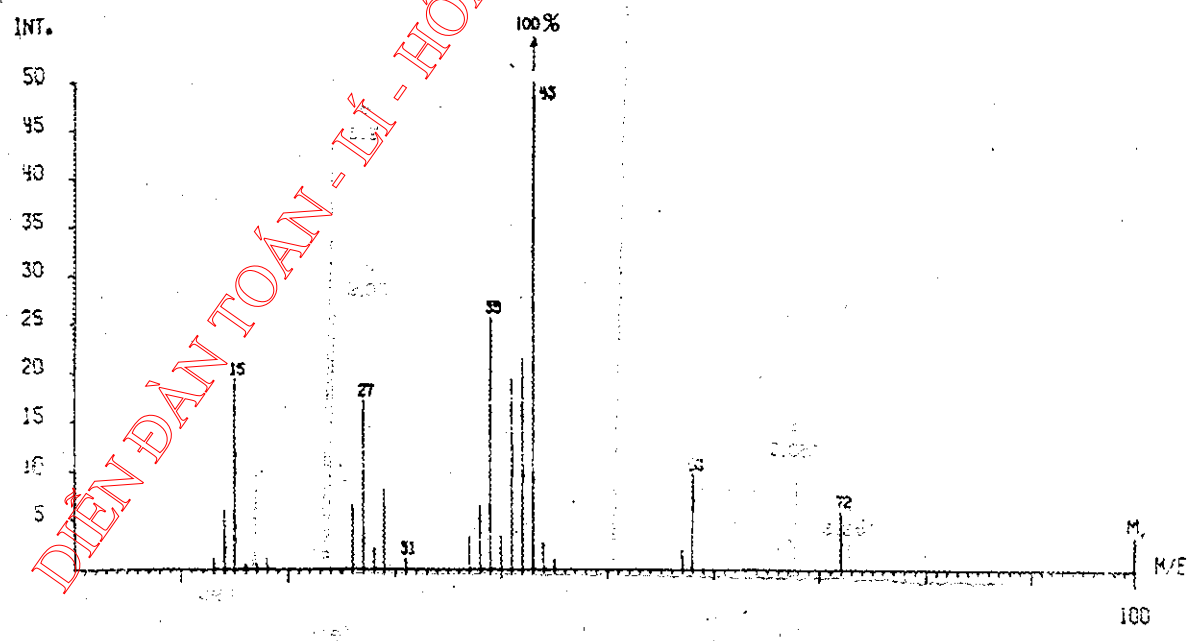
WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

IR: Perkin-Elmer Modell 125
Ghi trong $CHCl_3$



(a)

MS: Hitachi Perkin-Elmer
Modell RMU-6M



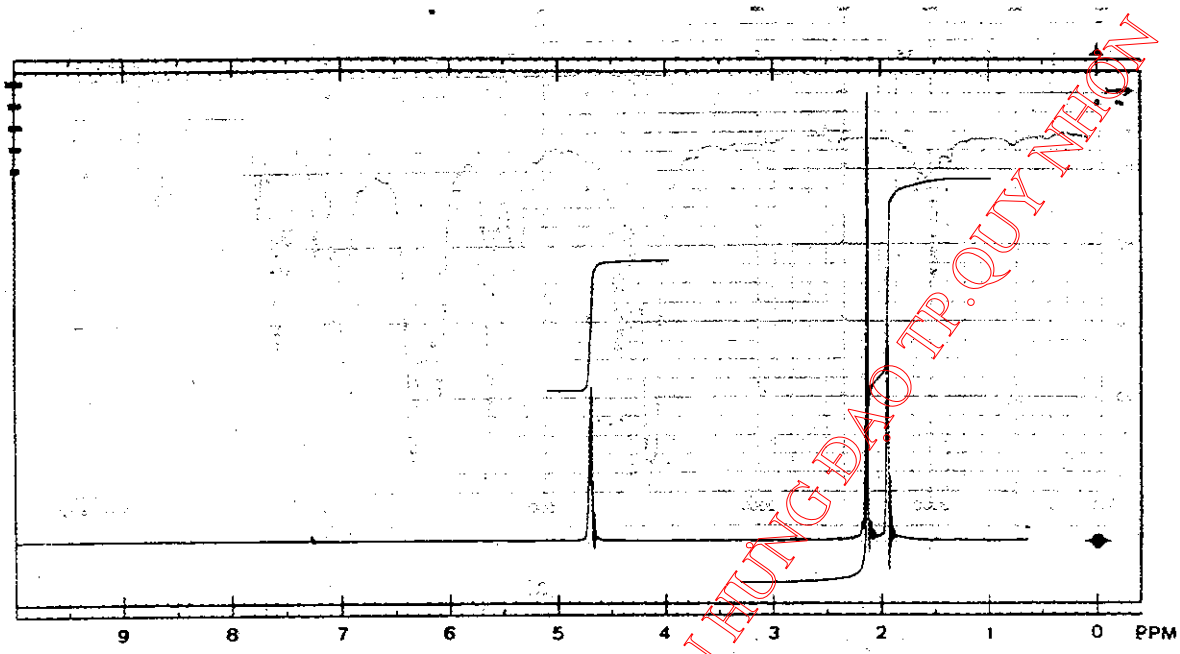
DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

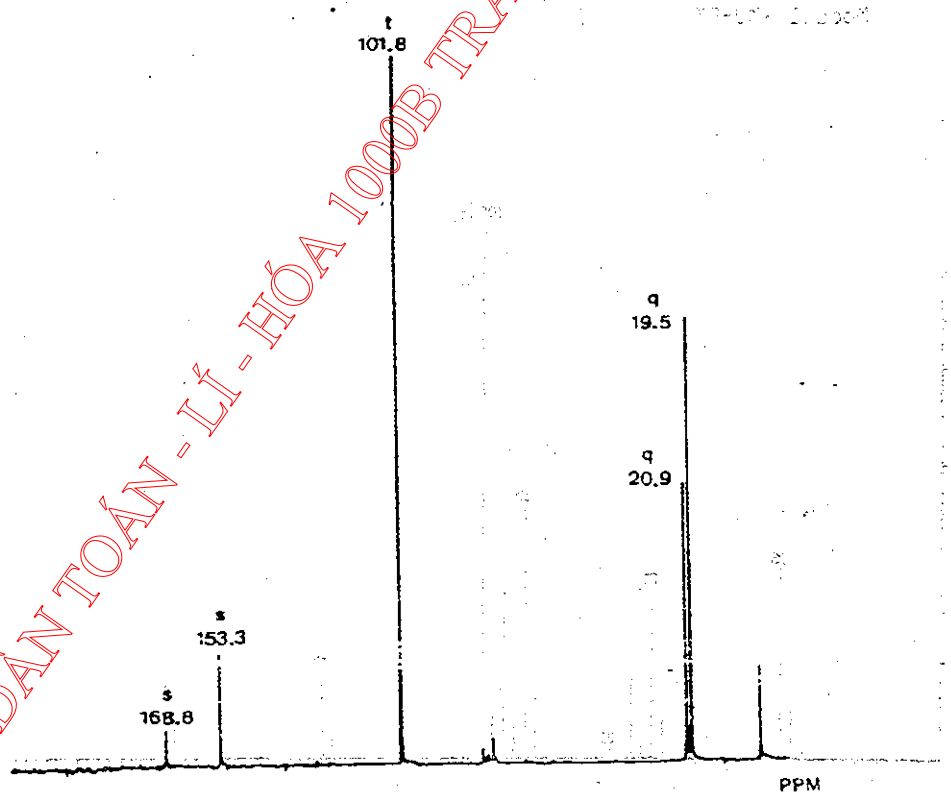
WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

^{1}H-NMR: Varian Modell HA-100
Sweep Width: 1000 Hz
Ghi trong $CDCl_3$

^{13}C-NMR: Bruker Spectrospin
Modell HFX-90
Ghi trong $CDCl_3$



(c)



(e)

XÓA TƯƠNG TÁC SPIN
Hình 9.11c, e

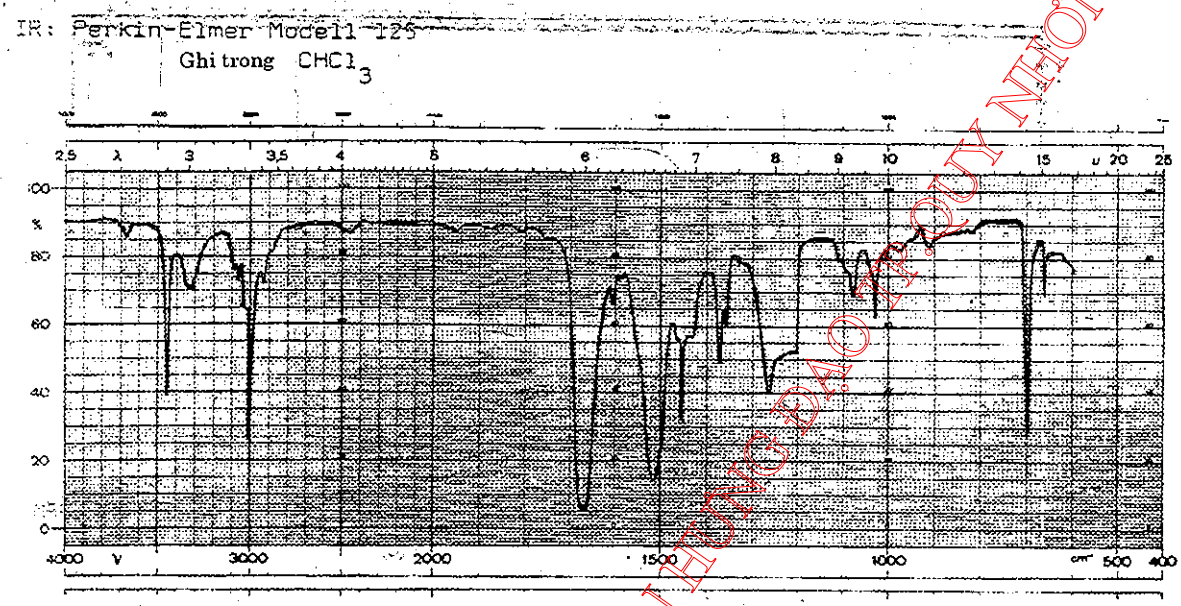
DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

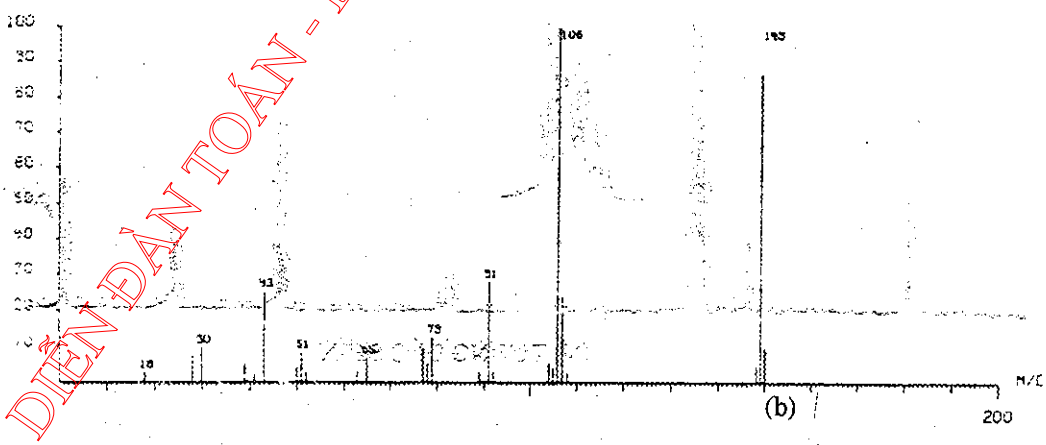
Bài tập 27:

Xác định công thức cấu tạo của chất có phổ ở hình 9.12a, b, c, e.



MS: Hitachi Perkin-Elmer
Modell RMU-6M

m*	$m_1 \longrightarrow m_2$	$+(m_1-m_2)$	m*	$m_1 \longrightarrow m_2$	$+(m_1-m_2)$
147	149 → 148	1	58.3	107 → 79	28
106	107 → 106	1	46.5	81 → 65	26
75.4	149 → 106	43			



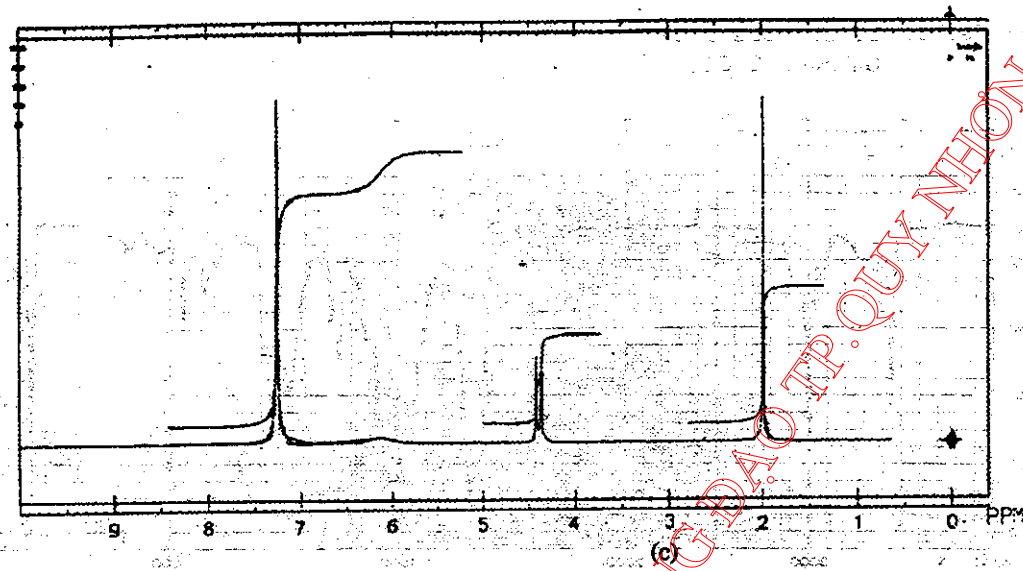
Hình 9.12a, b

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

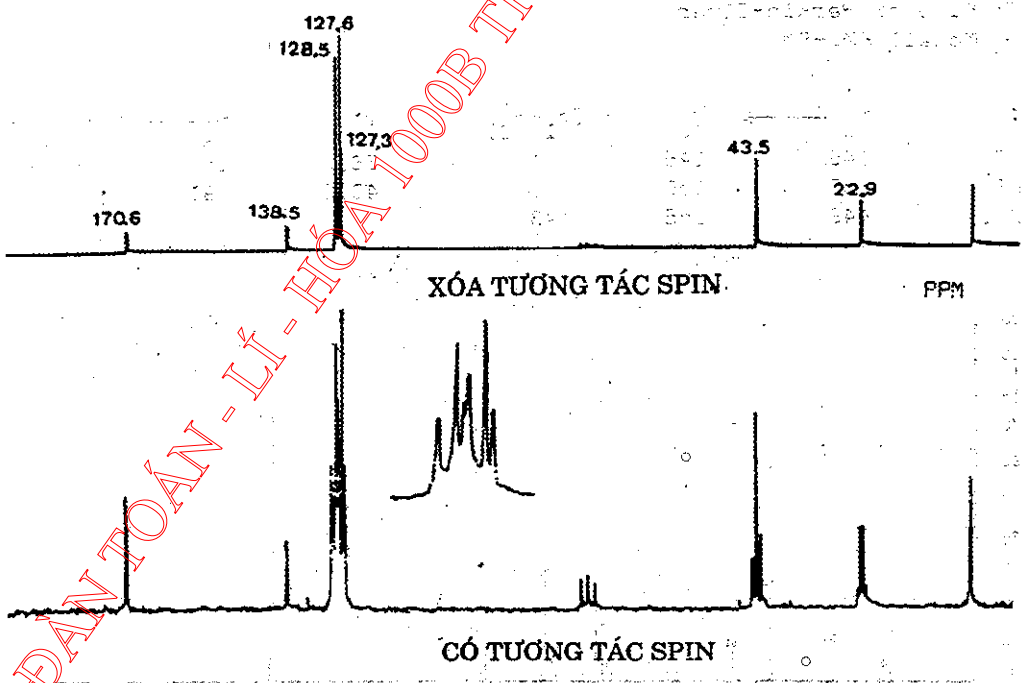
WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Sweep Width: 1000 Hz
Ghi trong $CDCl_3$



(c)

^{13}C-NMR: Varian Model1 XL-100
Ghi trong $CDCl_3$



Hình 9.12c,e

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

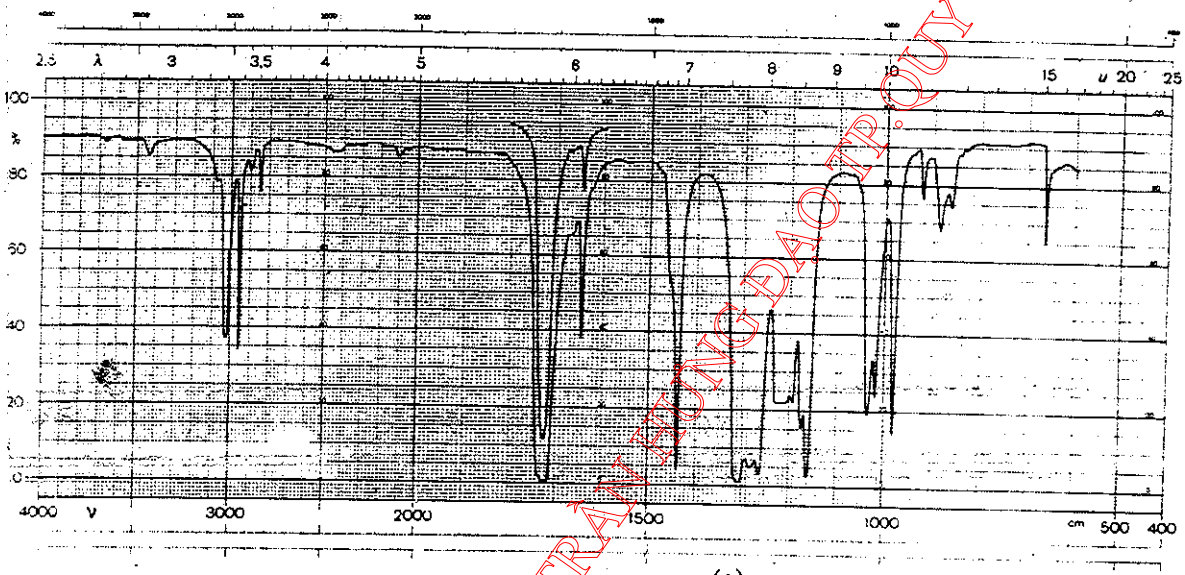
https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

Bài tập 28:

Xác định công thức cấu tạo của chất có phổ ở hình 9.13a, b, c, e, d.

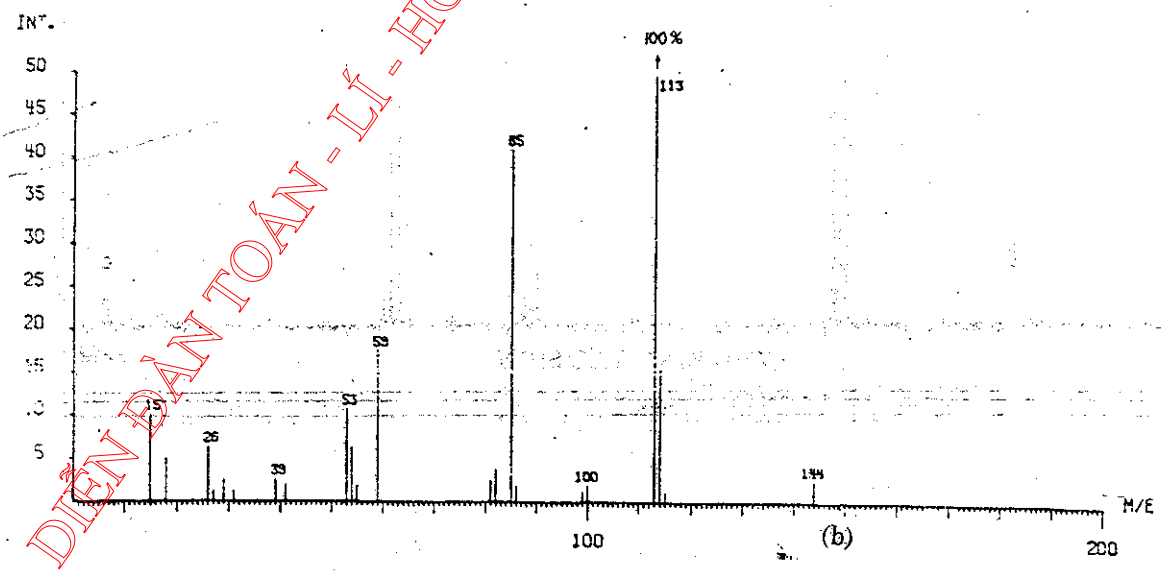
IR: Perkin-Elmer Modell 125 — Ghi trong $CHCl_3$

MS: Hitachi Perkin-Elmer Modell RMU-6M



(a)

m*	m_1	$\longrightarrow$	m_2	$(m_1 - m_2)$
98.3	144		114	30
86.7	144		113	31
63.9	113		85	28
50.2	144		85	59



(b)

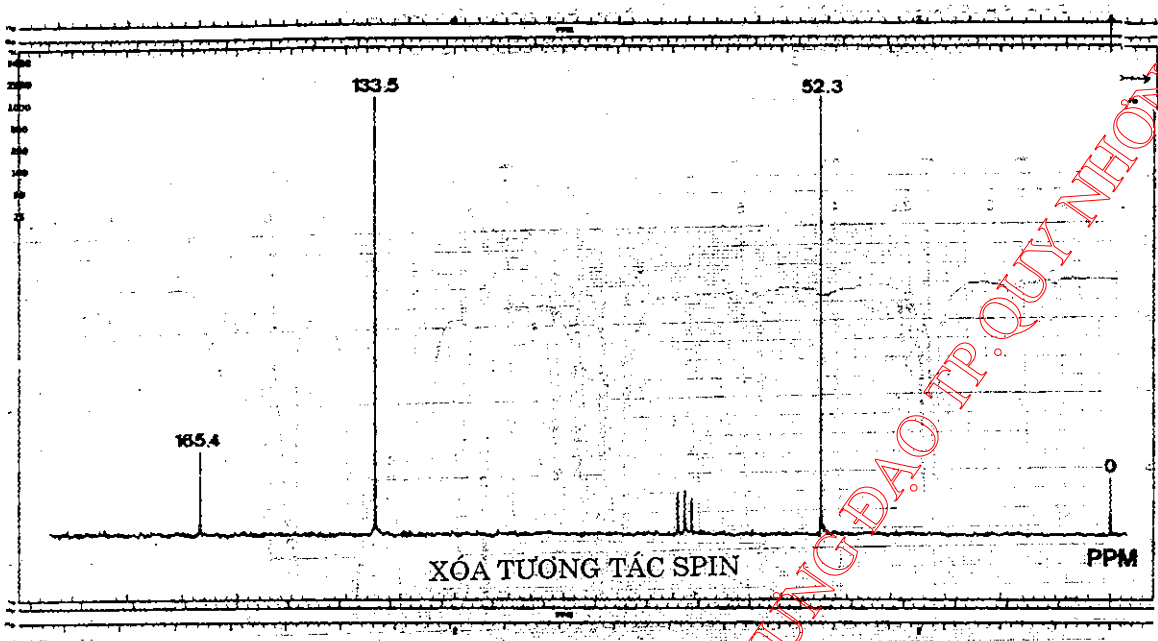
Hình 9.13a, b

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

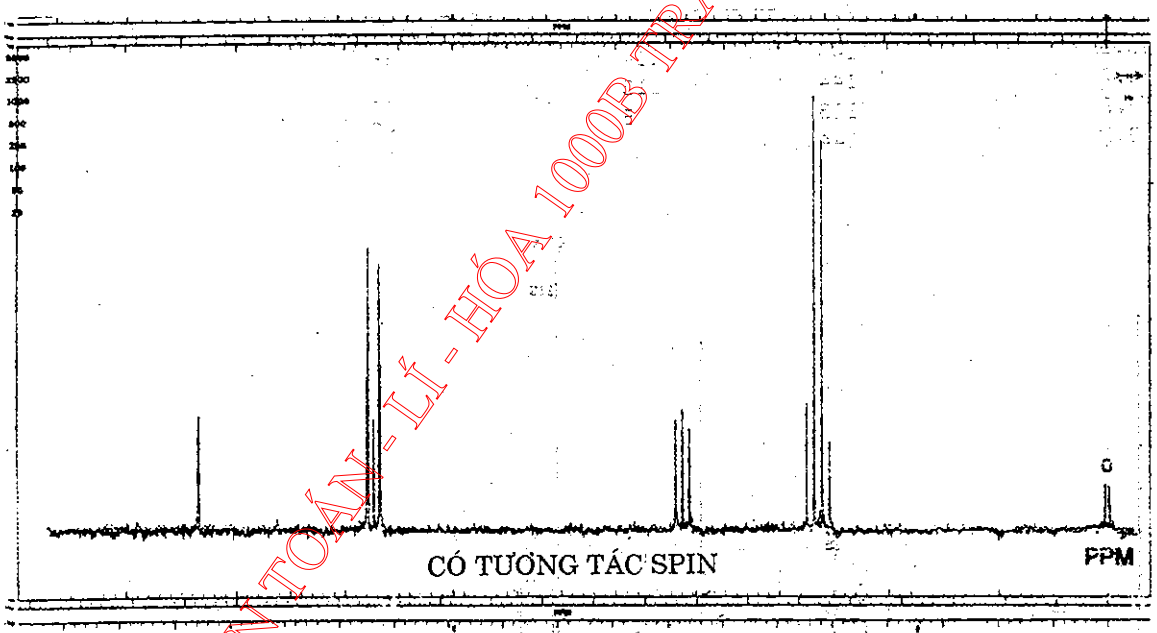
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

^{13}C-NMR: Varian Modell XL-100(25.2 MHz)
Ghi trong $CDCl_3$



(c)



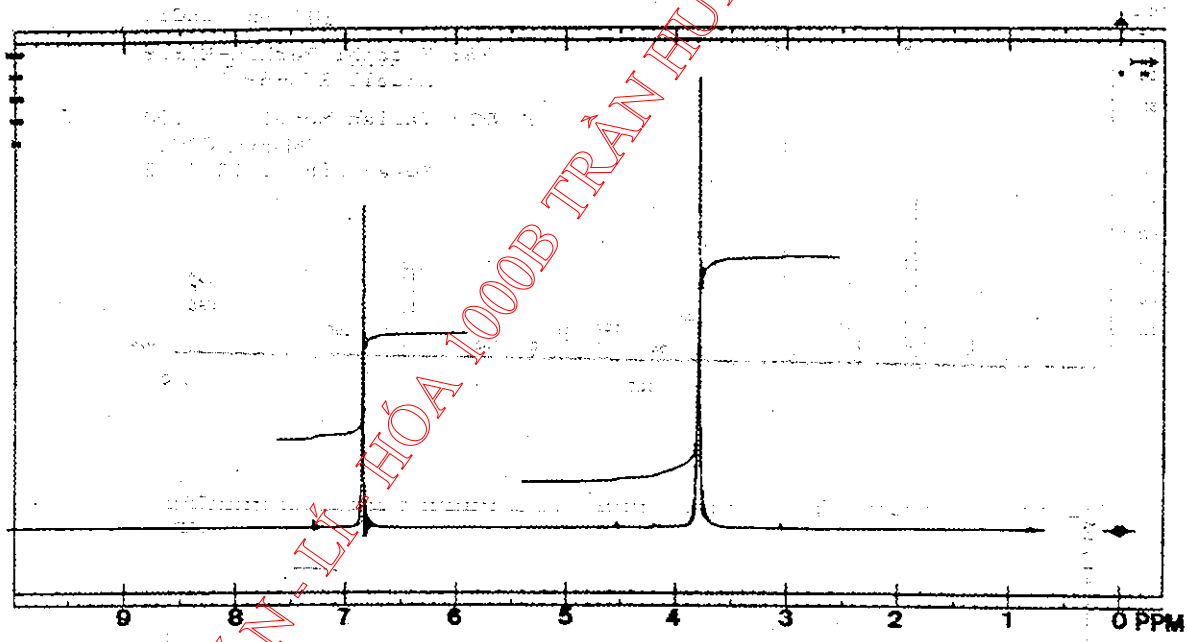
(e)

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

^{1}H-NMR: Varian Model1 HA-100(100 MHz)
Sweep Width: 1000 Hz
Ghi trong $CDCl_3$



(d)

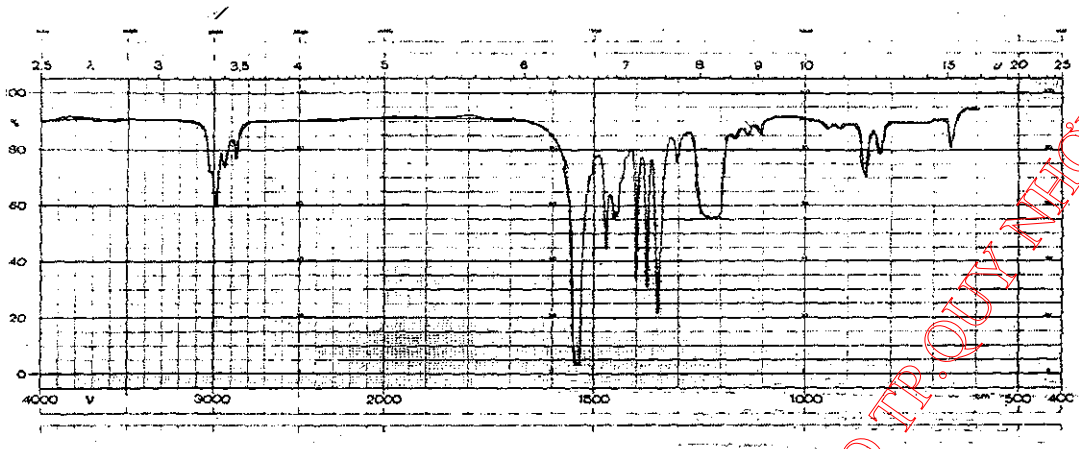
UV: Ghi trong MeOH
λ_{max} = 215nm (log ε = 4.17).

Hình 9.13c, e, d

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

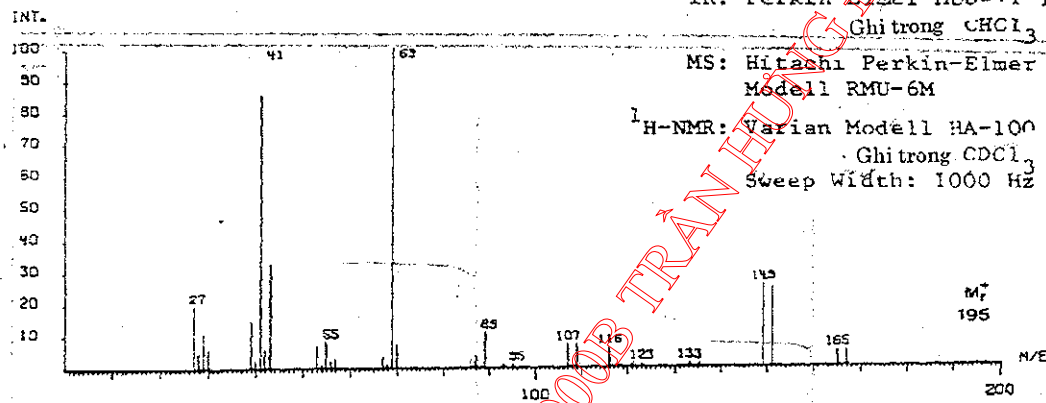
WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

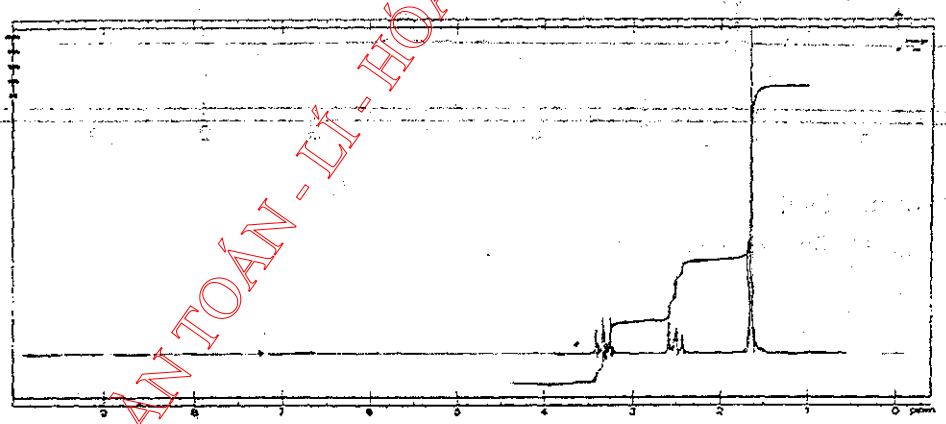


IR: Perkin-Elmer Modell 125
Ghi trong $CHCl_3$

MS: Hitachi Perkin-Elmer
Modell RMU-6M

^{1}H-NMR: Varian Modell HA-100
Ghi trong $CDCl_3$
Sweep Width: 1000 Hz





Hình 9.14a, b

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 10000 TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

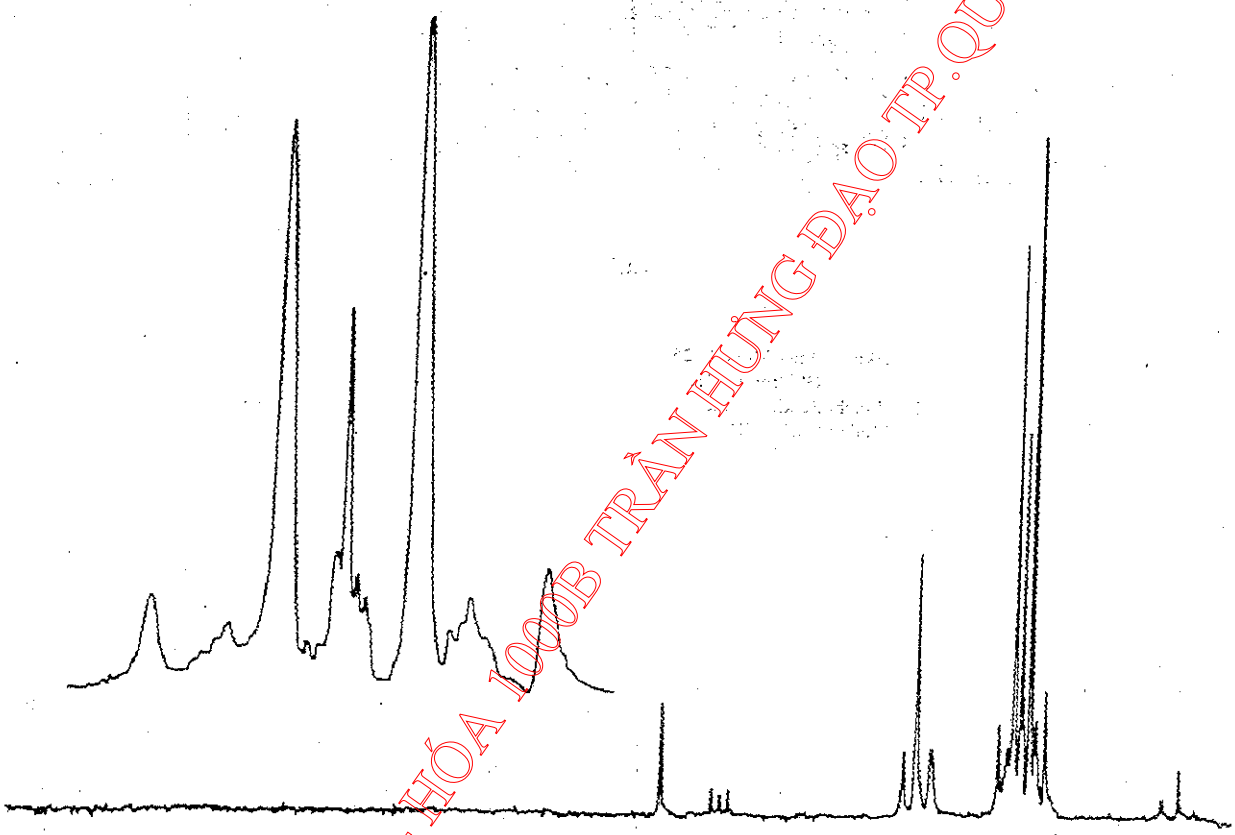
WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Bài tập 29:

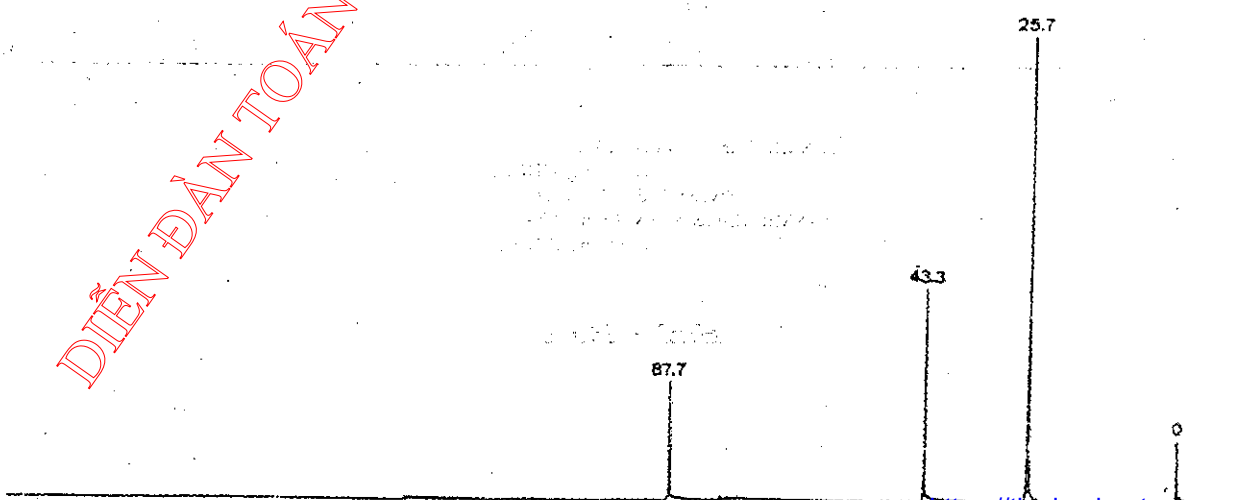
Xác định công thức cấu tạo của chất có phổ ở hình 9.14a, b, c, e.

^{13}C-NMR: Bruker- Spectrospin Modell HFX-90

Ghi trong $CDCl_3$



CÓ TƯƠNG TÁC SPIN



XÓA TƯƠNG TÁC SPIN

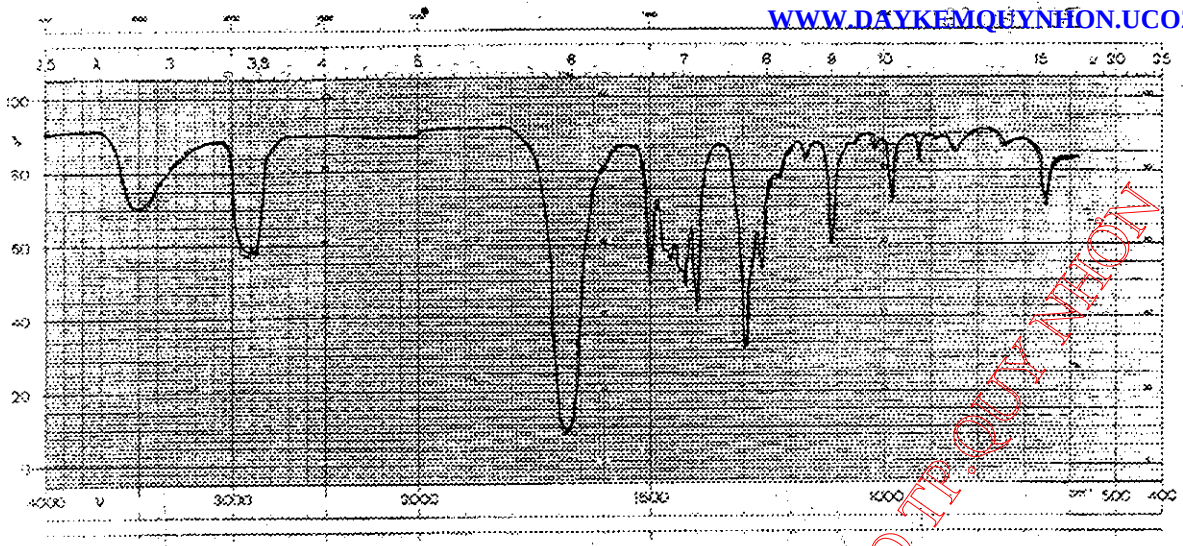
DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 10000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org

Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú

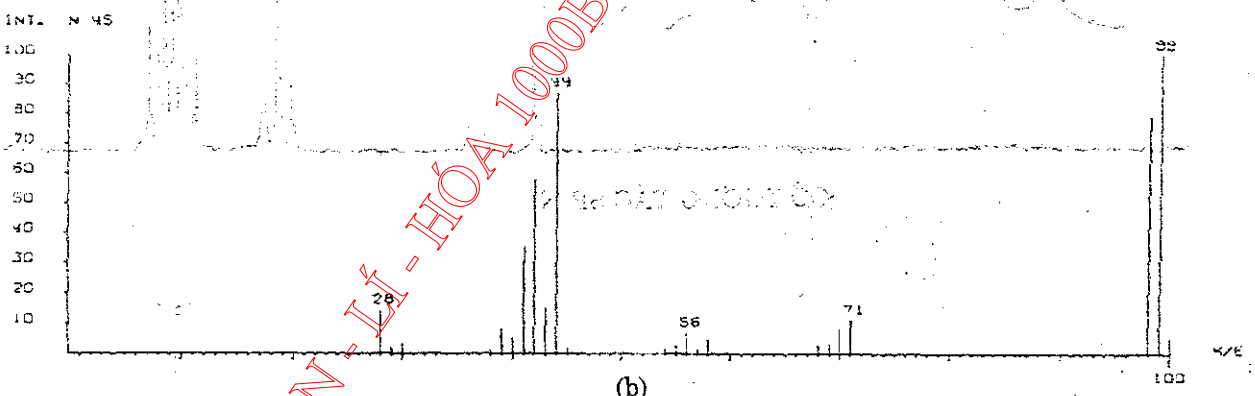
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM



(a)

IR: perkin - Elmer Modell 125
Ghi trong: $CHCL_3$
MS: Hitachi Perkin - Elmer
Modell RMU - SD



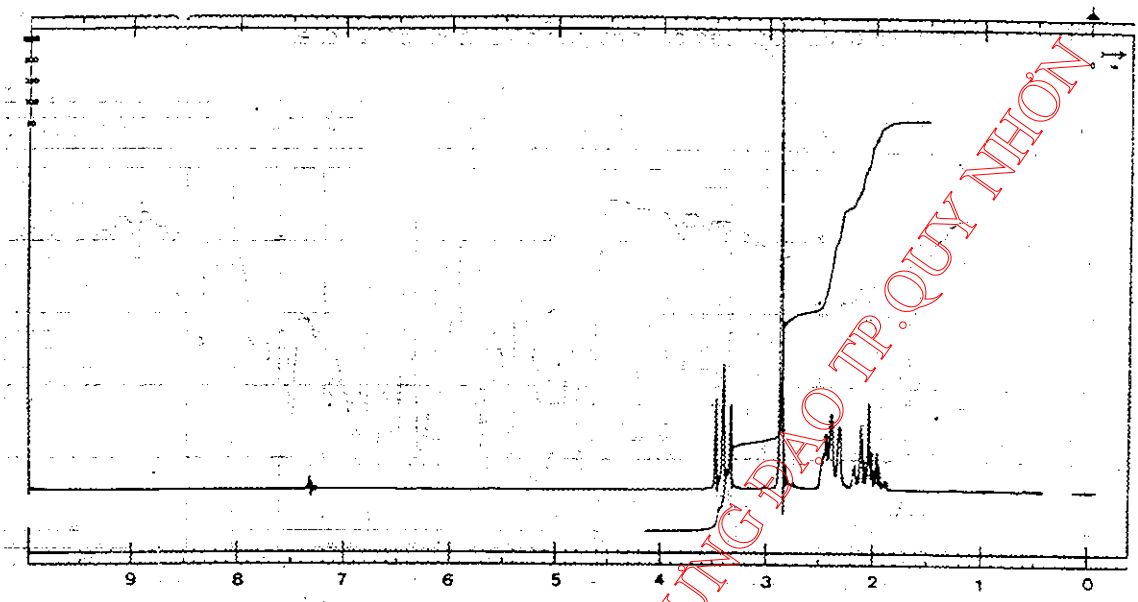
(b)

^{1}H-NMR: Varian Modell HA-100
Ghi trong: $CDCL_3$
Sweep Width: 1000 Hz
^{13}C-NMR: Bruker Soeotrospin HFX-90
Chi trong $CDCL_3$

Hình 9.15a, b

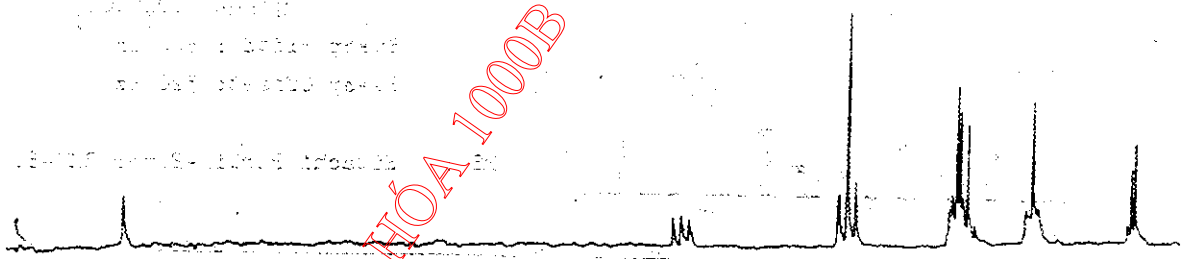
DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP.QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON



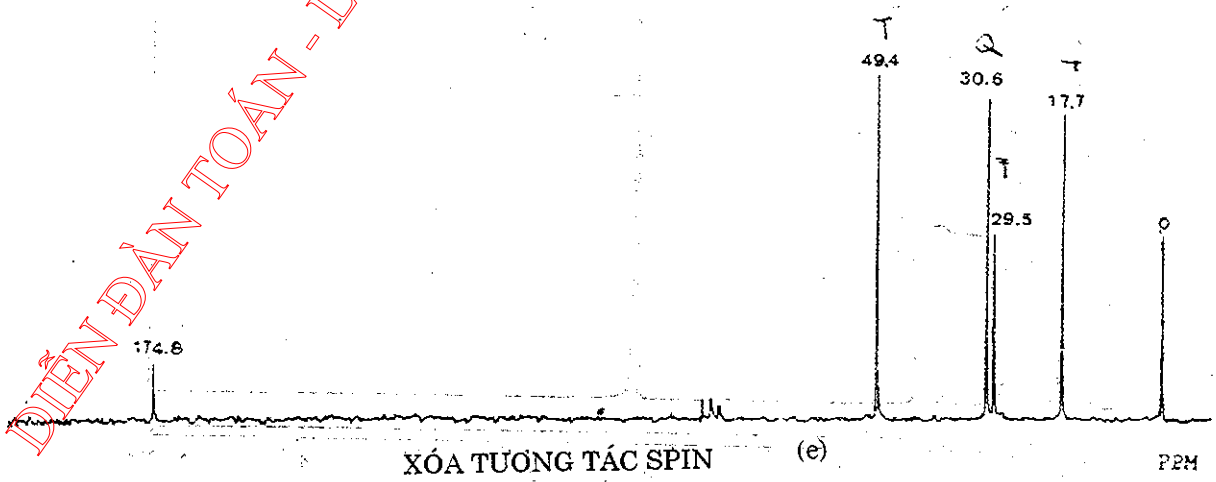
3956.3 Hz	174.8 ppm	85		666.5 Hz	29.5 ppm	547
1118.2 Hz	49.4 ppm	999		401.6 Hz	17.7 ppm	802
693.4 Hz	30.6 ppm	914		0.0 Hz	0.0 ppm	492

(c)



CÓ TƯƠNG TÁC SPIN

PPM



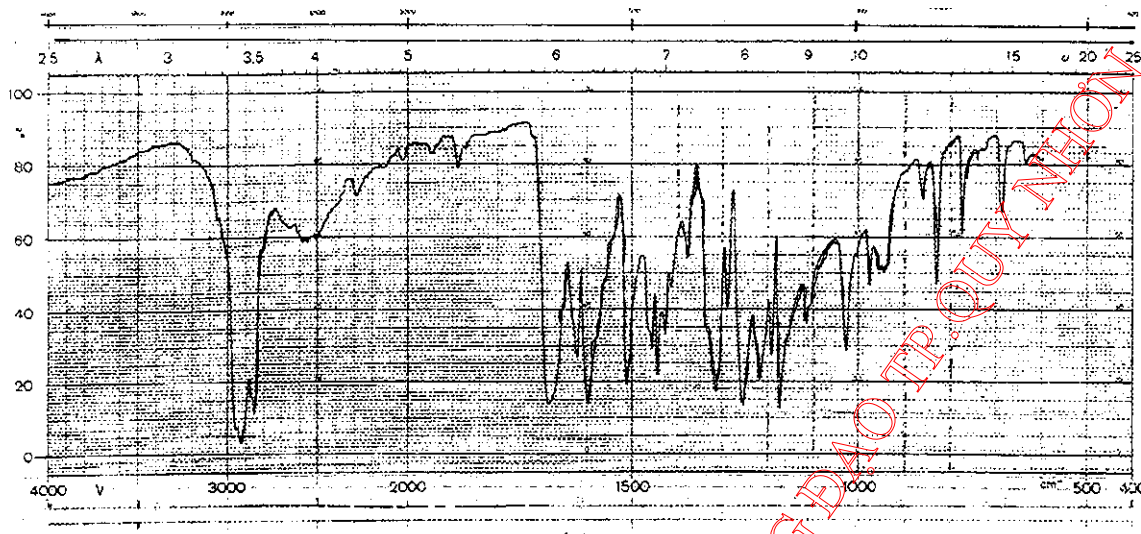
XÓA TƯƠNG TÁC SPIN (e)

PPM

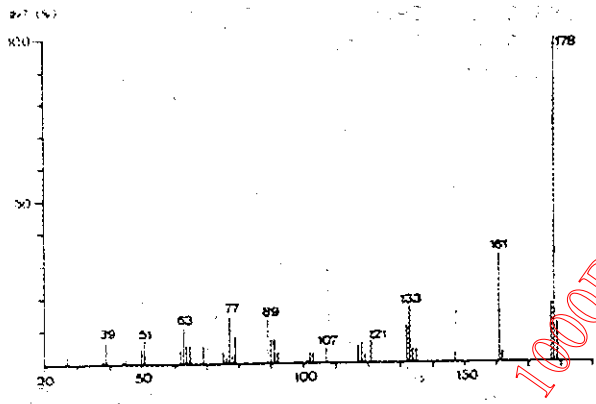
DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP.QUY NHƠN

Bài tập 31:

Xác định công thức cấu tạo của chất có phổ ở hình 9.16a, b, c, e.



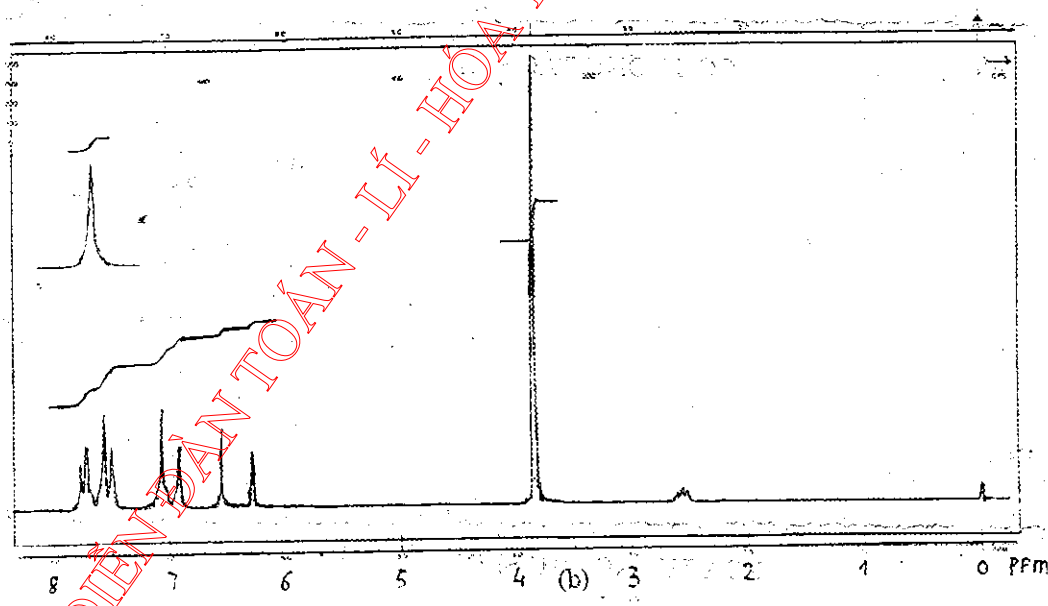
(a)



IR : Perkin-Elmer Modell 125
Ghi trong Nujol

NMR : Varian Modell A-60A
Ghi trong $(CD_3)_2SOCD_3$
Sweep Width : 500 Hz
Sweep Offset: 320 Hz

MS : Hitachi Perkin-Elmer RMU-6D



(b)

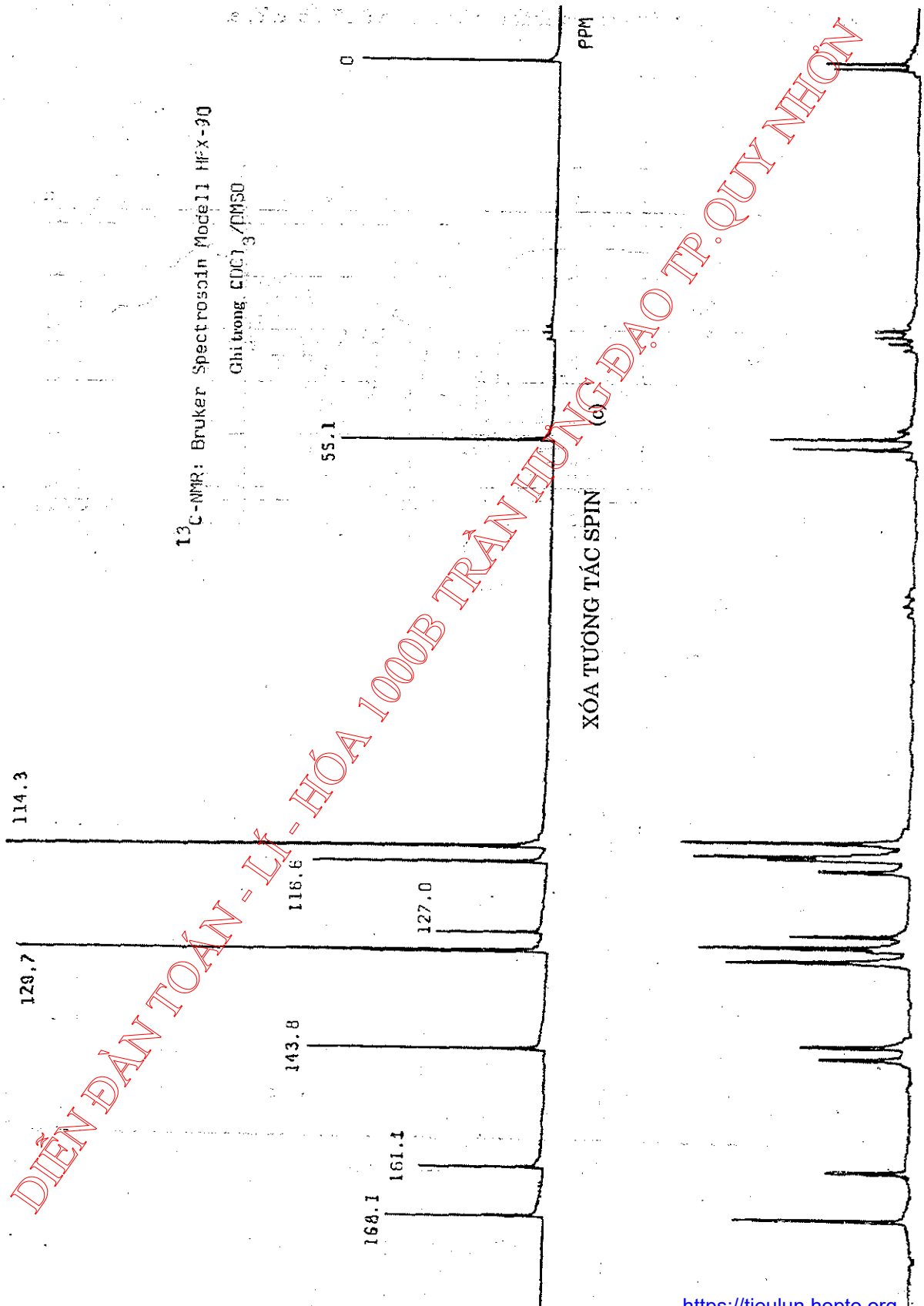
Hình 9.16a, b

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

Bài tập 30:

Xác định công thức cấu tạo của chất có phổ ở hình 9.15a, b, c, e.



DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org

Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú

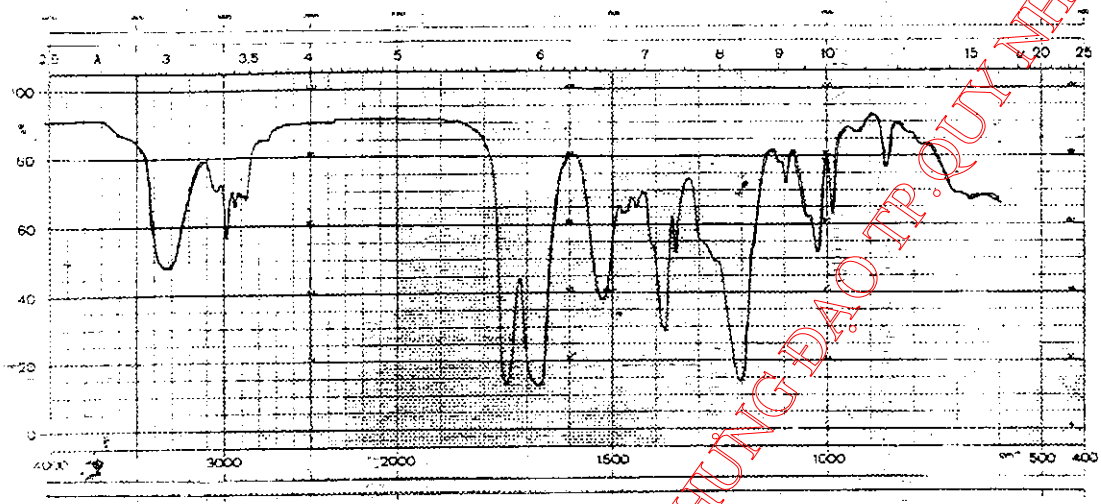
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Bài tập 32:

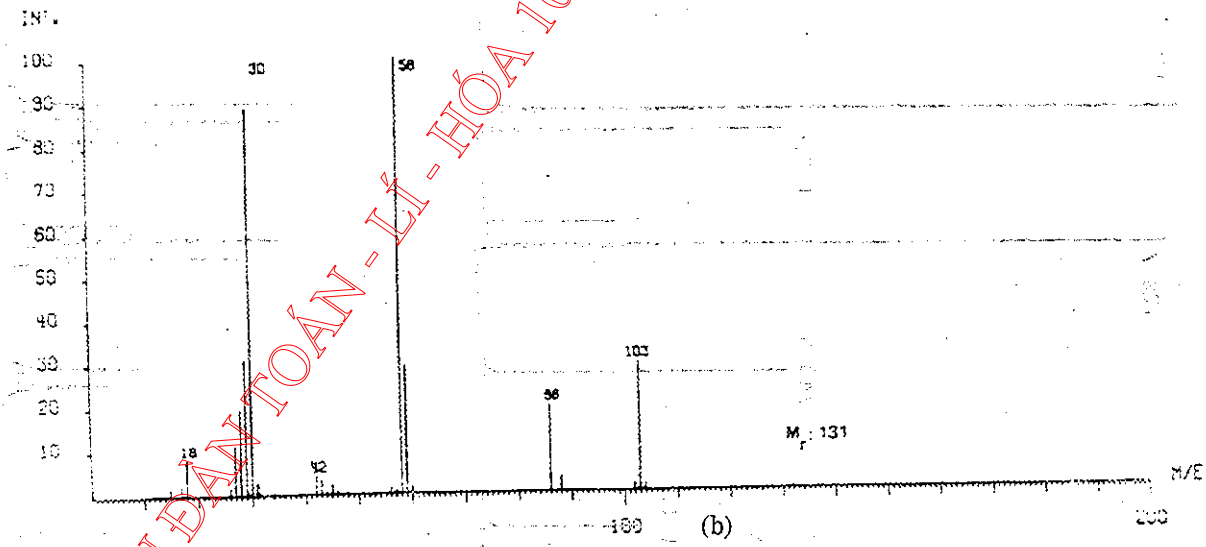
Xác định công thức cấu tạo của chất có phổ ở hình 9.17a, b, c, d, e.

IR: Perkin-Elmer Modell 125



(a)

MS: Hitachi Perkin-Elmer
Modell RMU-6M



(b)

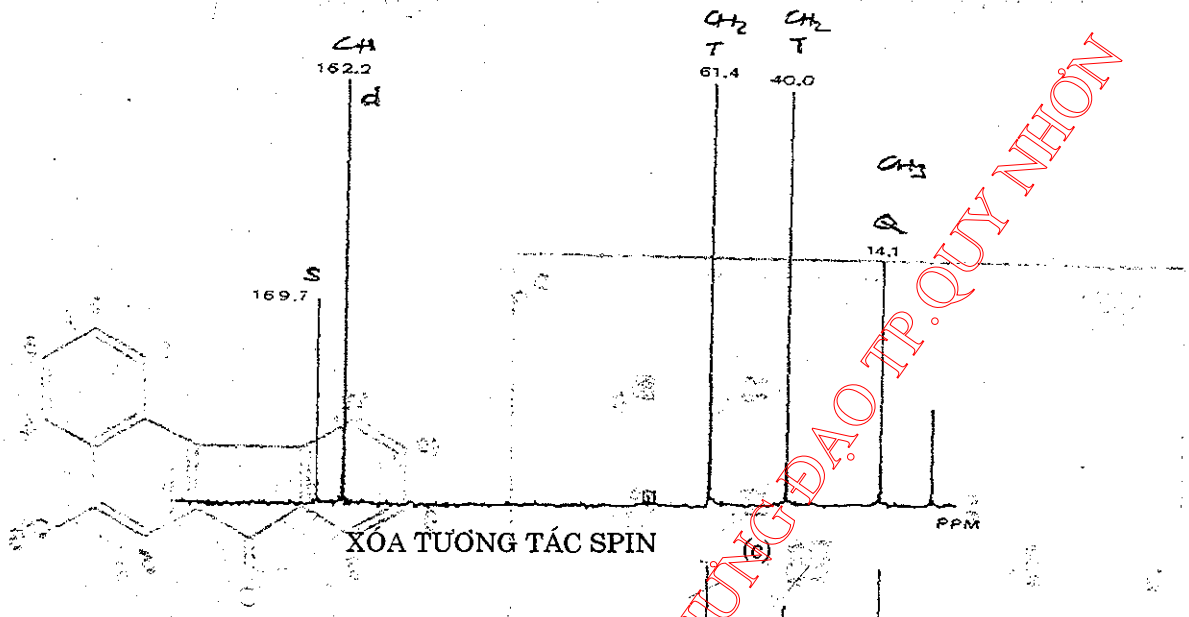
Hình 9.17a, b

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

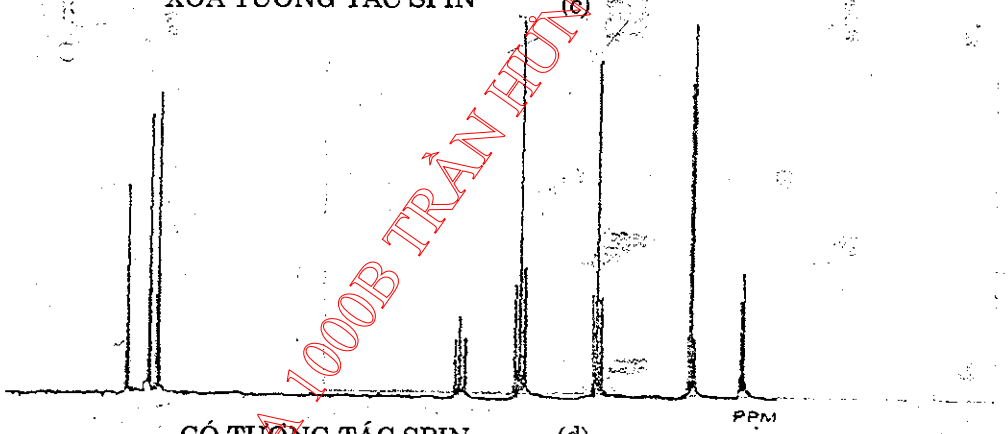
https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

^{13}C NMR: Bruker Spectrospin
Modell HFX - 90
Ghi trong $CDCl_3$

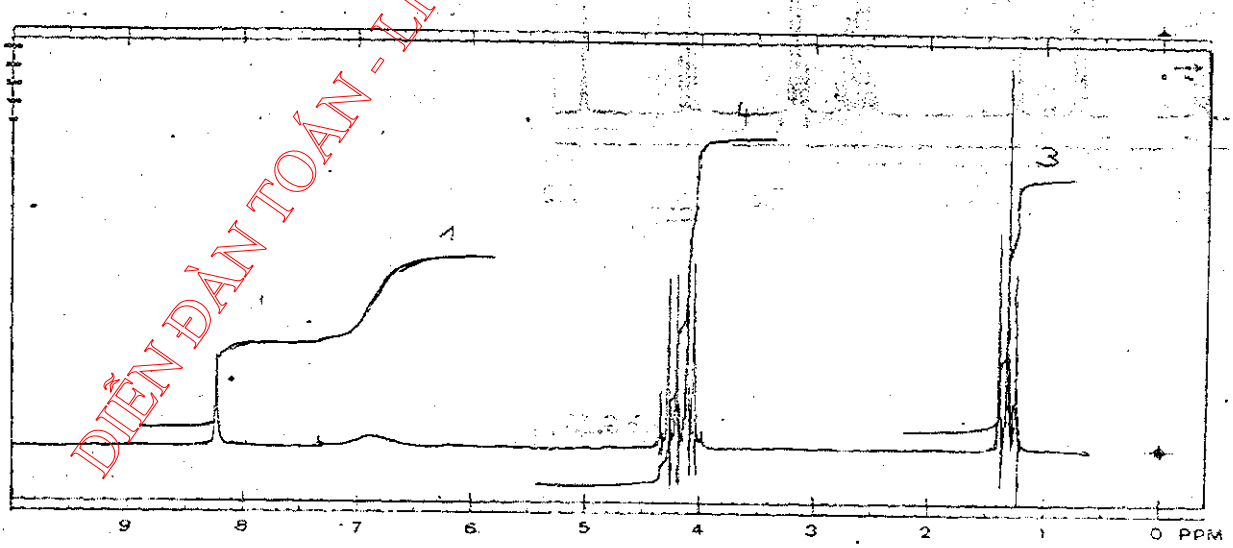


XÓA TƯƠNG TÁC SPIN (c)



CÓ TƯƠNG TÁC SPIN (d)

^{1}H - NMR: Varia Modell HA-100
Sweep Width: 1000Hz
Ghi trong: $CDCl_3$

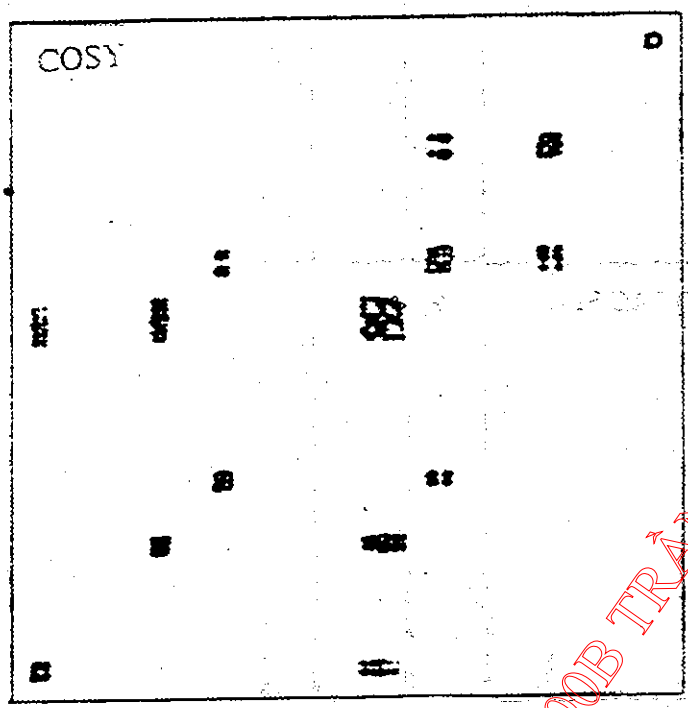


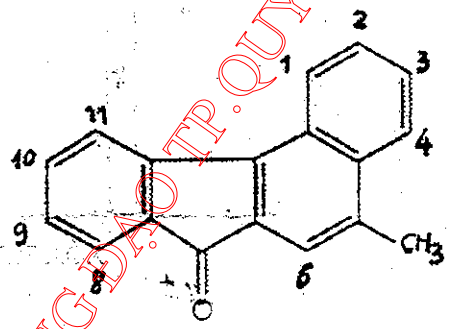
DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

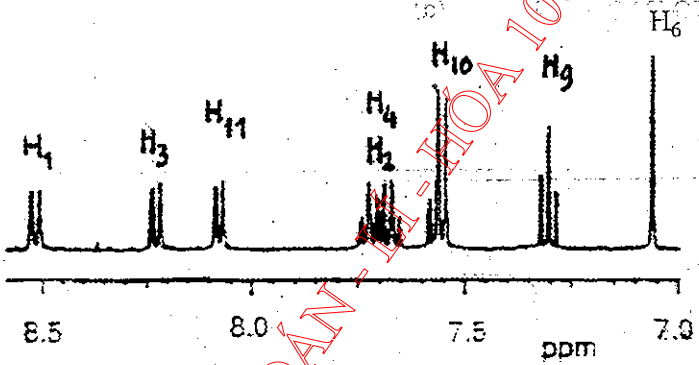
https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

Bài tập 33:

Giải thích phổ CHTHN – ^{1}H và COSY (hình 9.18) của hợp chất dưới đây:







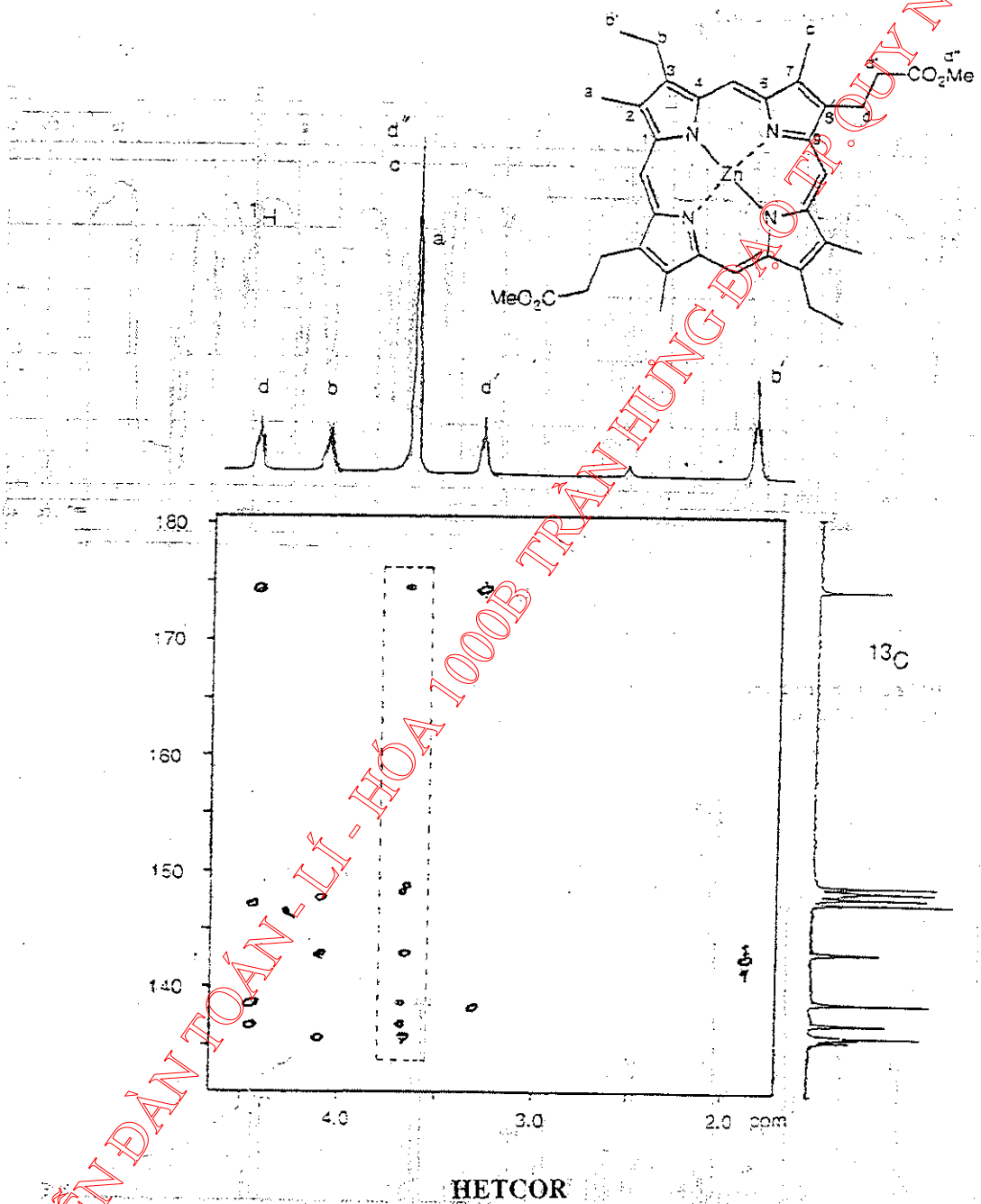
Hình 9.18

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÝ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

Bài tập 34:

Giải thích phổ HETCOR (hình 9.19) của hợp chất dưới đây:



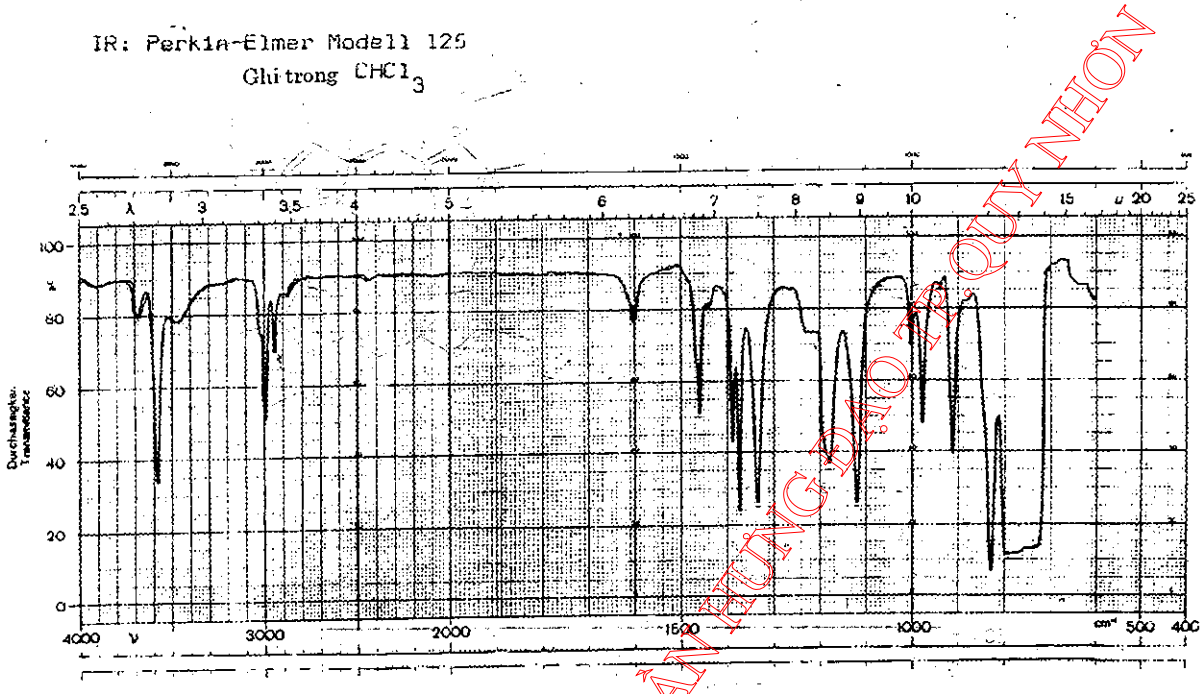
HETCOR

Hình 9.19

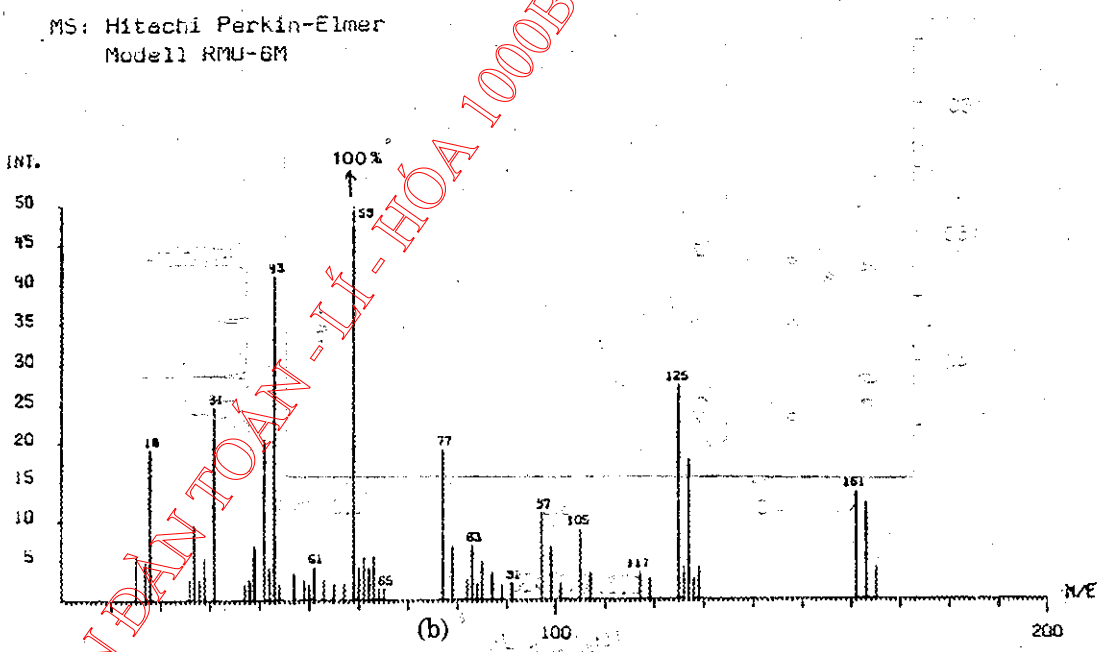
DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

Bài tập 35:

Xác định công thức cấu tạo của chất có phổ ở hình 9.20a, b, c, d.



(a)



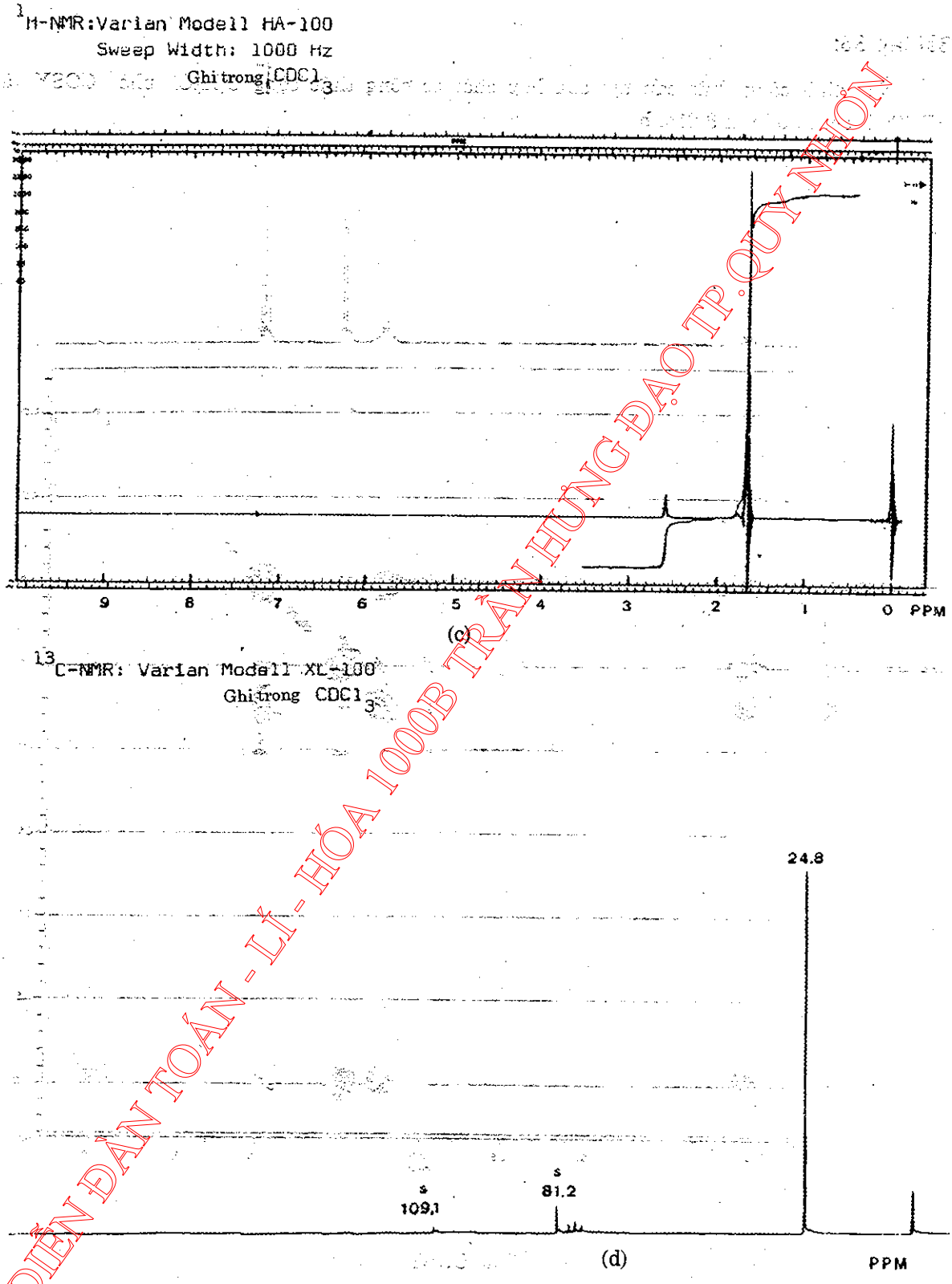
(b)

Hình 9.20a, b

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM



Hình 9.20c, d

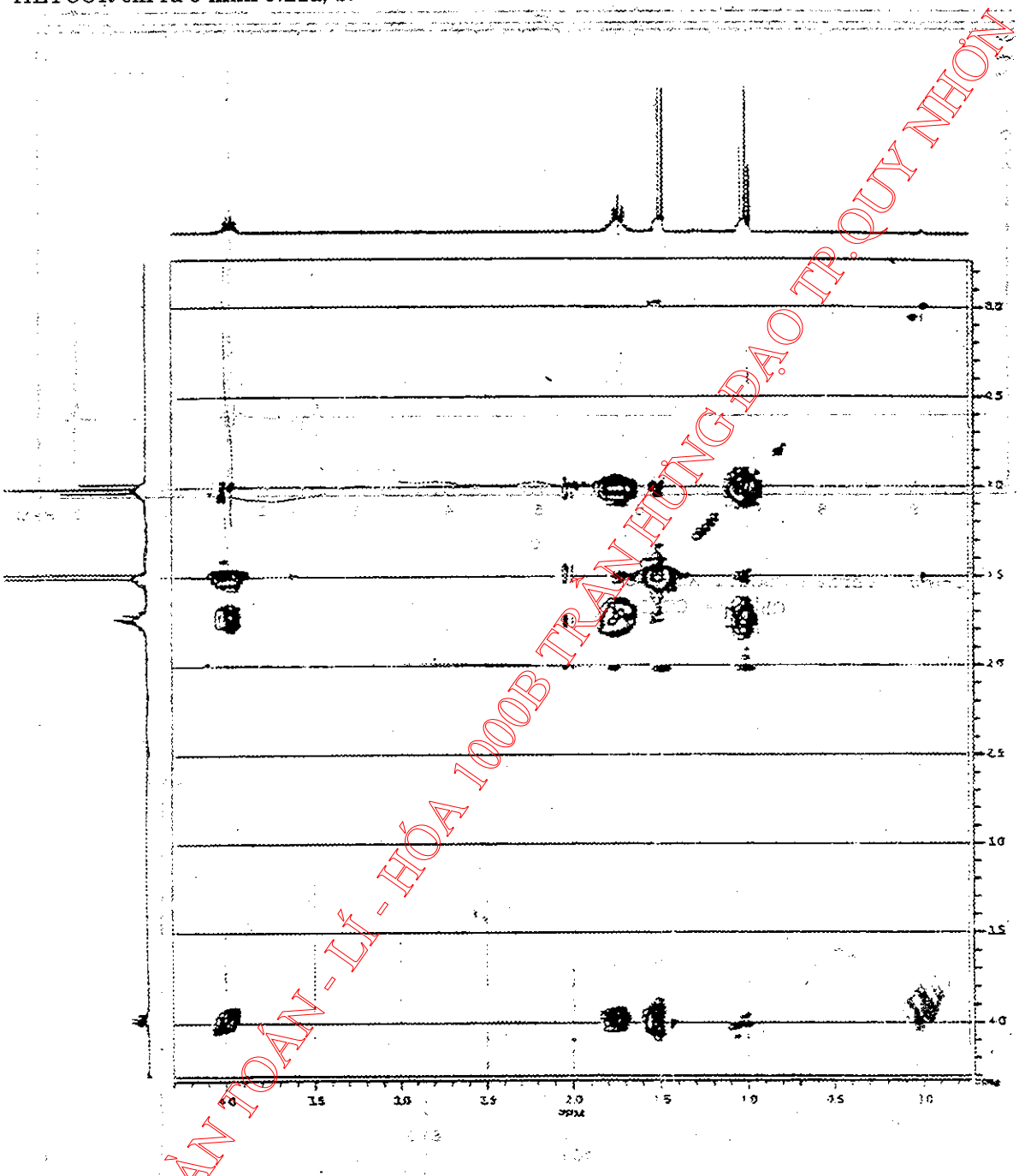
DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Bài tập 36:

Xác định công thức cấu tạo của hợp chất có công thức cộng C_4H_9Cl, phổ COSY và HETCOR chỉ ra ở hình 9.21a, b.



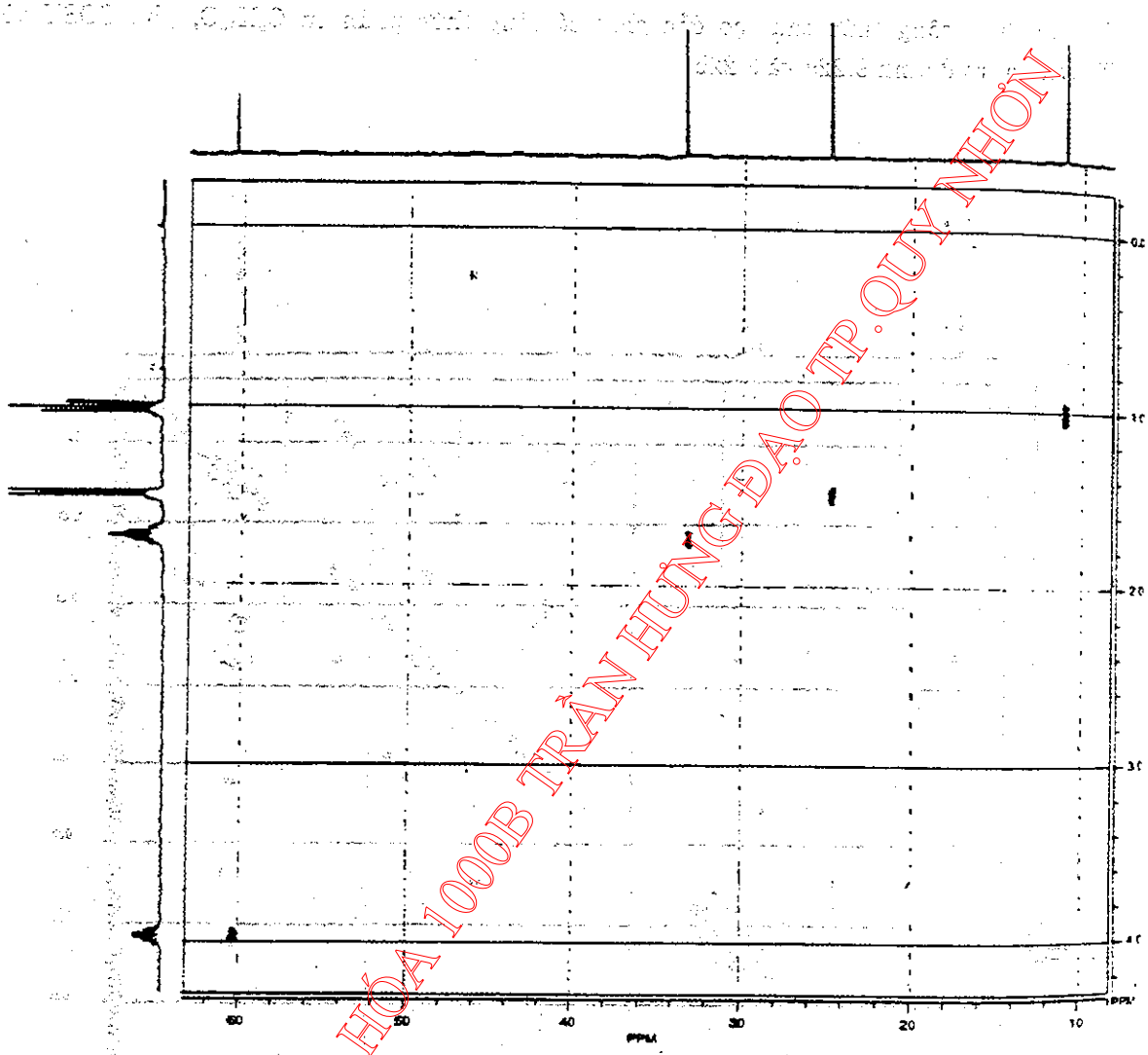
Phổ COSY

Hình 9.21a

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM



Phổ HETCOR

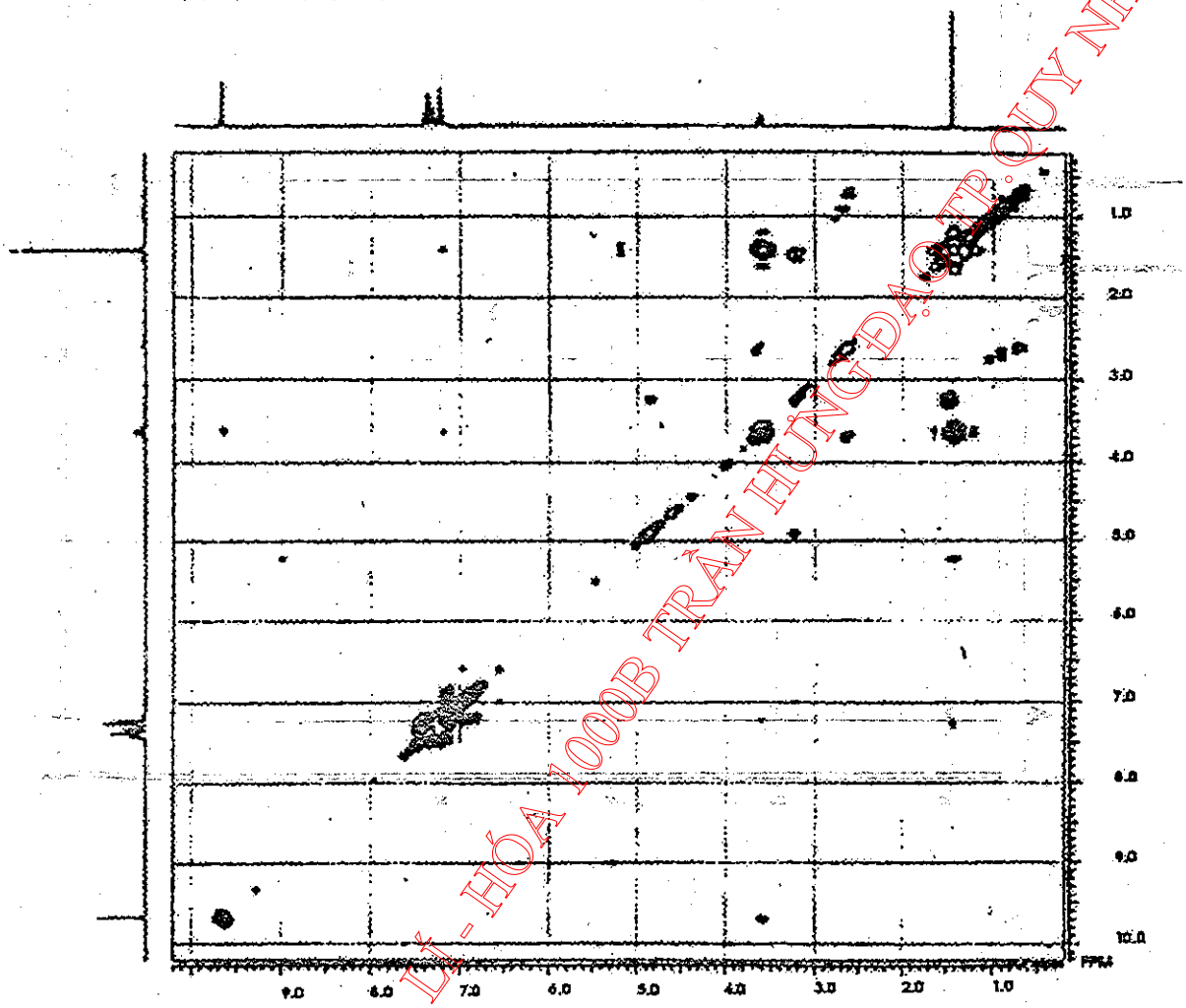
Hình 9.21b

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Xác định công thức cấu tạo của chất có công thức phân tử $C_9H_{10}O$, phổ COSY và HETCOR chỉ ra ở hình 9.22a và 9.22b.



PPP

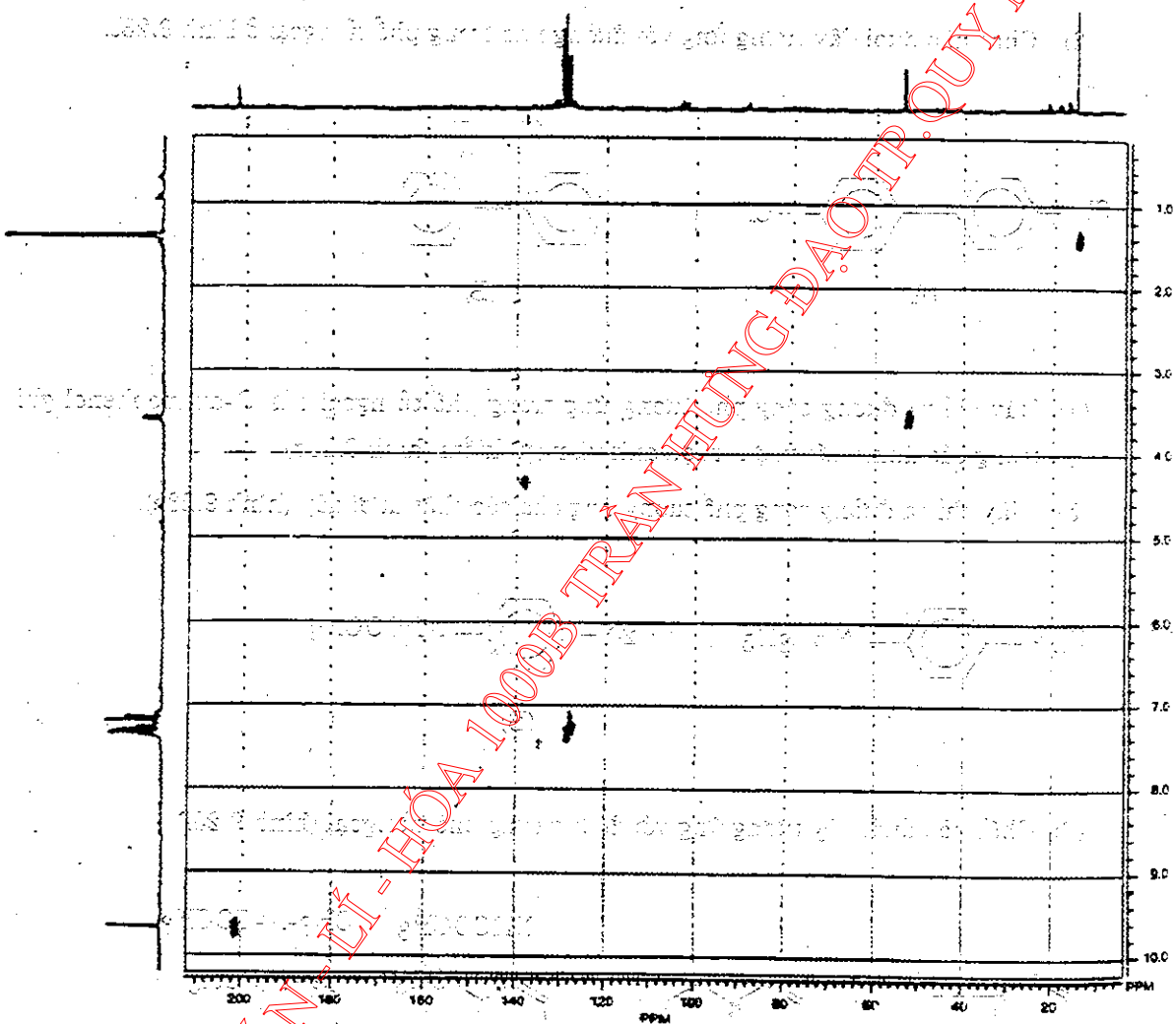
Phổ COSY

Hình 9.22a

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÝ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM



Phổ HETCOR

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

Hình 9.22b

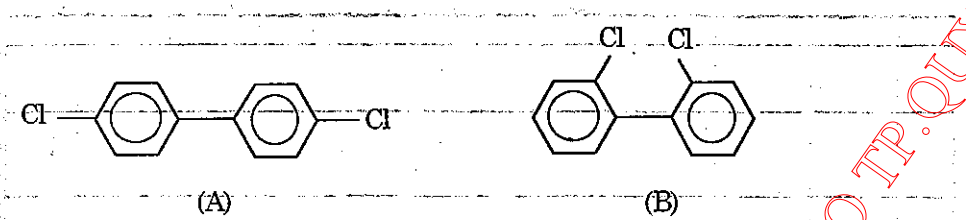
https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

(1) Xác định cấu tạo của hai hợp chất amin có công thức cộng C_7H_9N và phổ tử ngoại chỉ ra ở hình 9.23a.

(2) Xác định cấu tạo của hai hợp chất có công thức cộng $C_8H_8O_2$ và phổ tử ngoại chỉ ra ở hình 9.23b.

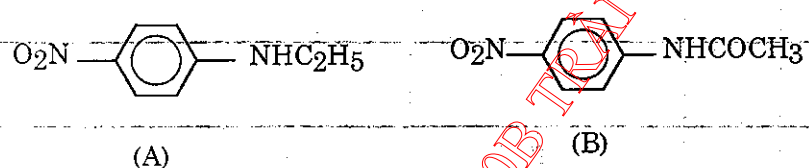
(3) Chất nào dưới đây tương ứng với đường nào trong phổ tử ngoại ở hình 9.23c.



(A) (B)

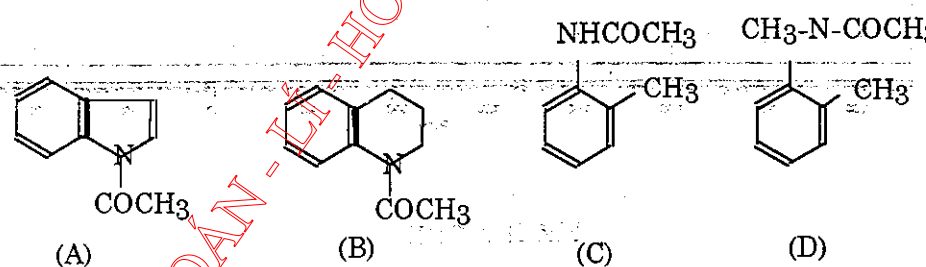
(4) Hãy chỉ ra đường cong phổ tương ứng trong phổ tử ngoại của O-aminophenol ghi trong các dung môi rượu, rượu-axit và rượu-kiềm (hình 9.23d).

(5) Hãy chỉ ra đường cong phổ tương ứng của các chất dưới đây (hình 9.23e).



(A) (B)

(6) Chất nào dưới đây tương ứng với đường cong phổ tử ngoại (hình 9.23f).



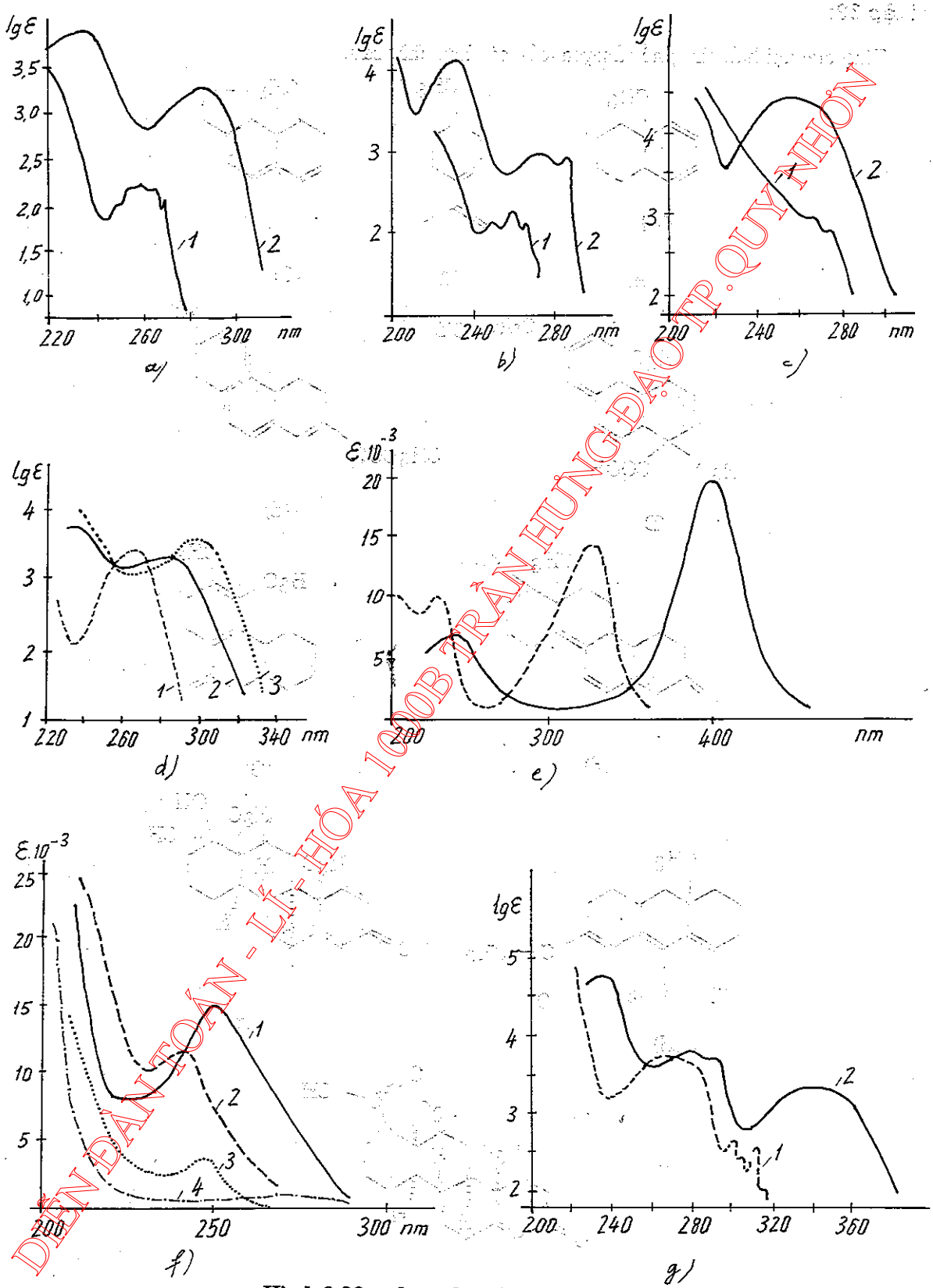
(A) (B) (C) (D)

(7) Hãy chỉ ra đường cong phổ tương ứng của chất α - naphtylamin ghi trong dung môi rượu và rượu axit (hình 9.23g).

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM



Hình 9.23 a, b, c, d, e, f, g

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP.QUY NHƠN

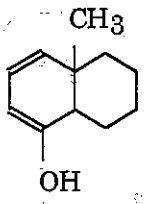
https://tieulun.hopto.org

Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú

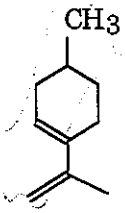
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

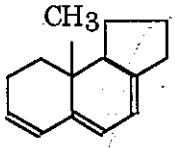
Tính cực đại hấp thụ phổ tử ngoại của các hợp chất sau:



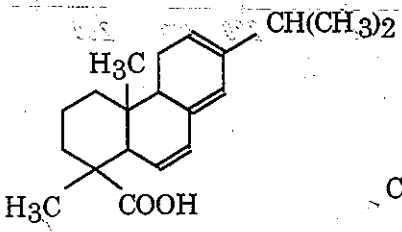
(A)



(B)

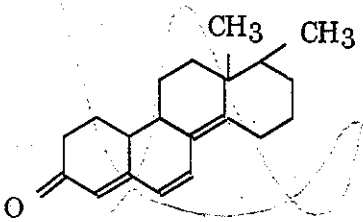


(C)

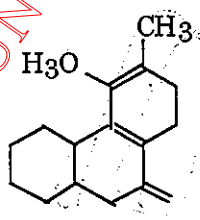


(D)

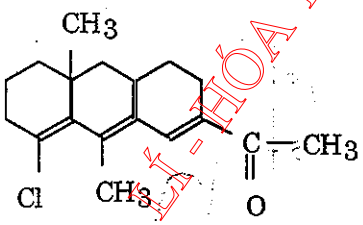
(E)



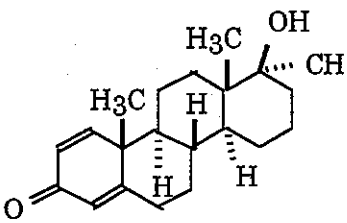
(F)



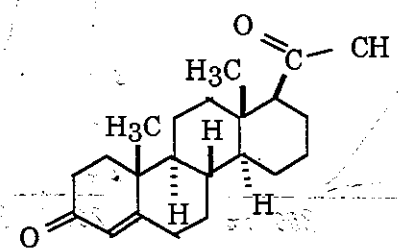
(G)



(H)



(I)



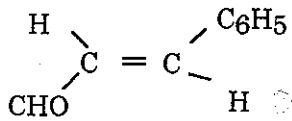
(K)

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÝ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

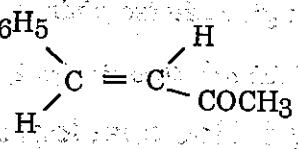
https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

Bài tập 40

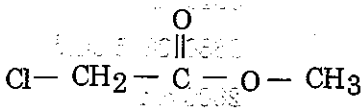
a) Tính độ chuyển dịch hóa học phổ cộng hưởng từ hạt nhân proton của các phân tử sau:



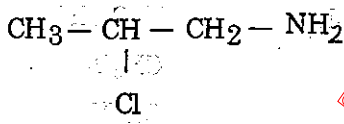
(A)



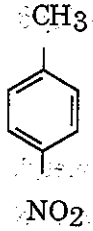
(B)



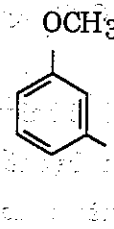
(C)



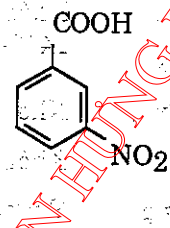
(D)



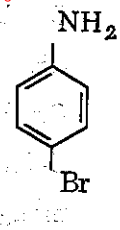
(E)



(F)

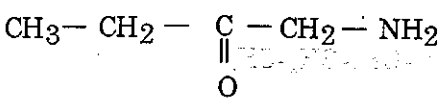


(G)

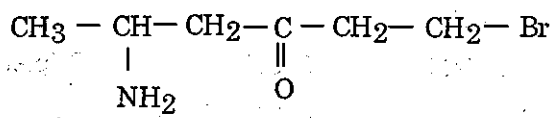


(H)

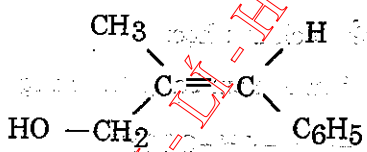
b) Tính độ chuyển dịch hóa học phổ cộng hưởng từ hạt nhân ^{13}C của các phân tử sau:



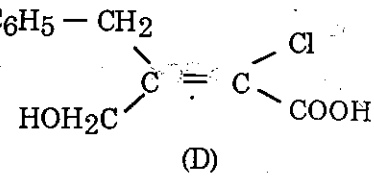
(A)



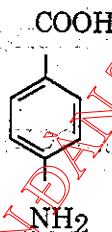
(B)



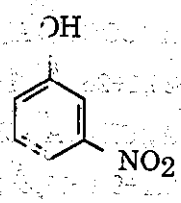
(C)



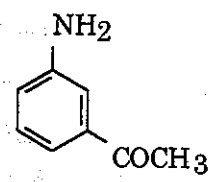
(D)



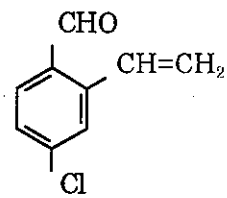
(E)



(F)



(G)



(H)

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÝ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org

Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

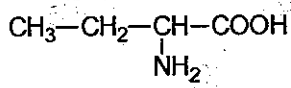
Phụ lục

Sự liên quan giữa cấu tạo phân tử và các dữ kiện phổ

(Trích dẫn theo tài liệu 2, 6, 24, 26)

Bảng 1. Hợp chất loại ankan C-C.

Vị trí	Xếp loại	Ghi chú	
IR	CH ht	H-C-Hal	3010 cm^{-1}
2960-2850 cm^{-1}		CH_3O-	2830-2815 cm^{-1}
m		CH_3N-	2800 cm^{-1}
		-O-CH_2-O	2780 cm^{-1}
1460 cm^{-1}	CH_3 bd kđx	Nhóm CH_2 cạnh C=C hay nhân thơm hấp thụ ở 1440-1400 cm^{-1}.	
bđ	CH_2 bd kđx		
1380 cm^{-1}	CH_3 bd kđx	Nhóm *gem*-metyl có hai vạch.	
bđ	C-C ht	Không có ý nghĩa thực tế, trừ nhóm *gem*-metyl.	
1350-1100 cm^{-1}	mạng xương	Tương tự: vùng này có dao động của =C, Ar, NH_2, NO. Dao động hoá trị của CS, SO, PC, CCl.	
720 cm^{-1}			
tb			
UV		Không có ý nghĩa thực tế.	
λ_{max}<210 nm			
^{1}H-NMR	C-CH_3	Triplet đặc trưng ở -CH_2-CH_2-CH_3	
0,8-1,2 ppm	C-CH_2-C	H- 0,3-0,8 ppm	
1,1-1,8 ppm	C-CH-C	J_{CH-CH} 6-7 Hz khi không quay.	
^{13}C-NMR		Tính độ chuyển dịch hóa học:	
0-50 ppm	>^{13}C<	δ=-2,3+ΣA_i (giá trị A_i xem bảng 4.6 trang 95)	



δ_{C1}=-2,3+A_α(COOH)+A_α(NH_2)+A_α(CH_2)+A_β(CH_3)

δ_{C1}=-2,3+20,1+28,3+9,1+9,4=**64,6 ppm.**

δ_{C2}=-2,3+A_α(CH_3)+A_α(CH)+A_α(NH_2)+A_β(COOH)

δ_{C2}=-2,3+9,1+9,1+11,3+2=**29,2 ppm.**

δ_{C3}=-2,3+A_α(CH_2)+A_β(CH)+A_γ(NH_2)+A_γ(COOH)

δ_{C3}=-2,3+9,1+9,4-5,1-2,8=**8,3 ppm.**

MS	Ion phân tử	*n*-ankan	yếu
		i-ankan	rất yếu

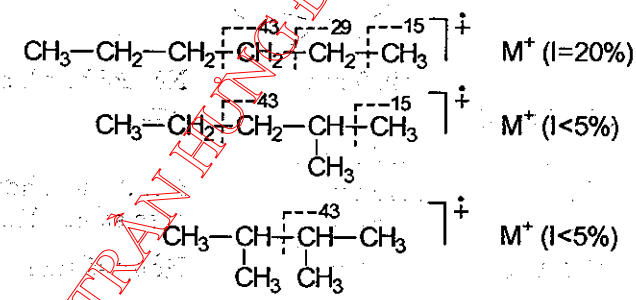
DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Bảng 1 (tiếp theo)

Vị trí	Xếp loại		Ghi chú
	Phân mảnh	*n*-ankan	m/e= 29,43,57,71,85...14*n*+1
			cực đại ở m/e=43 hay 57
			cực tiểu ở m/e=M-15
		i-ankan	m/e=29,43,57,71,85...
		monoxiclan	m/e=27,41,55,69...14*n*+1
	Chuyển vị	*n*-ankan	Không có



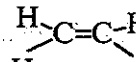
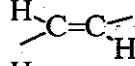
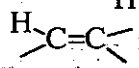
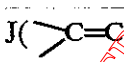
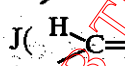
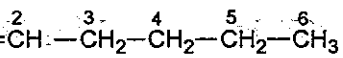
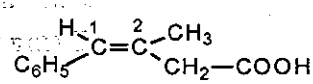
Bảng 2. Hợp chất loại anken C=C.

Vị trí	Xếp loại	Ghi chú	
IR		Thường nhiều đỉnh.	
3100-2975 cm^{-1}	=CH ht	Vắng ở hợp chất nối đôi thế 4 lần.	
bđ			
1690-1640 cm^{-1}	C=C ht	Ít thấy nếu thế 4 lần.	
tb		Vắng ở hợp chất đối xứng cao.	
		Mạnh ở O-C=C và N-C=C.	
		Loại thế có thể xác định được:	
		Tương tự: C=O liên hợp	
		N-H bd	
		C=N ht	
		N=O ht	
		Enol: C=C	1605 cm^{-1}
		C=O	1640 cm^{-1}
		Đien không liên hợp 2 đỉnh ở	1650 và 1600 cm^{-1}
		Polien liên hợp: đỉnh rộng ở	1650-1580 cm^{-1}

DIỄN ĐÀN TOÁN-LÍ-HÓA 10000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Vị trí	Xếp loại	Ghi chú
1420-1290 cm^{-1}	=CH bd	Không có ý nghĩa thực tế.
y	(trong mặt phẳng)	
990-675 cm^{-1}	=CH bd	Đôi khi có hai đỉnh.
m	(ngoài mặt phẳng)	
915-905 cm^{-1}	$-CH=CH_2$ bd	
895-885 cm^{-1}	$>C=CH_2$ bd	
690±15 cm^{-1}	 bd	Tương tự $-CH_2-C=C$ bd 1445-1430 cm^{-1}
970-960 cm^{-1}	 bd	
840-790 cm^{-1}	 bd	
UV	>210 nm	Nối đôi biệt lập; có nhiều nhóm thế hấp thụ trên 210 nm.
$R-(CH=CH)_n-R$		
n=2	217 nm	
n=3	275 nm	Nối đôi liên hợp hấp thụ trên 220 nm (lgε=4-5), tăng theo số nối đôi.
n=4	310 nm	
^{1}H-NMR	C=C-H	Hằng số tương tác spin-spin:
4,5-8 ppm		J() =0-3,5 Hz
		J() =5-14 Hz
		J( ) =0-3,5 Hz
^{13}C-NMR	>C=C<	
100-150 ppm		C^1 114,24 C^3 33,78 C^5 22,45 C^2 139,20 C^4 31,53 C^6 13,96
		Tính độ chuyển dịch hóa học: $\delta=123,3+\Sigma A_i+\Sigma A_{i\pi}$+ hiệu chỉnh ($A_i$, $A_{i\pi}$, hiệu chỉnh: xem bảng 4.7 trang 96).
		
		$\delta_C=123,3+A_\alpha(C_6H_5)+A_{\alpha\pi}(CH_3)+A_{\alpha\pi}(CH_2)+$ $+A_{\beta\pi}(COOH)$+hiệu chỉnh vicinal. $\delta_{C1}=123,3+12,5-7,9-7,9+0+vic=$ $=119,7+2,5=$**122,2 ppm.** $\delta_C=123,3+A_\alpha(CH_3)+A_\alpha(CH_2)+A_\beta(COOH)+$ $+A_{\alpha\pi}(C_6H_5)$ $\delta_{C1}=123,3+10,6+10,6+0-11,0=$**133,5 ppm.**

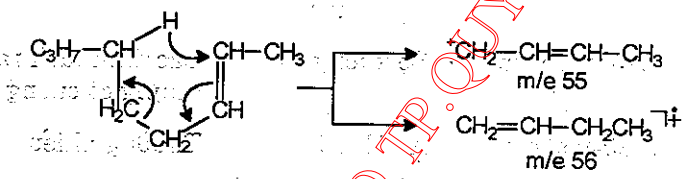
DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 10000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

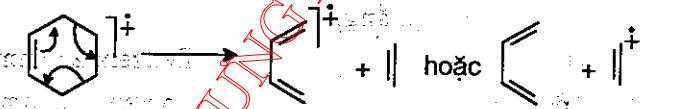
WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Bảng 2 (tiếp theo)

Vị trí	Xếp loại	Ghi chú
MS	Ion phân tử	Mạnh m/e=14*n*
	Phân mảnh	m/e=27,41,55,69,83...14*n*-1
	Chuyển vị	Thường có chuyển vị:

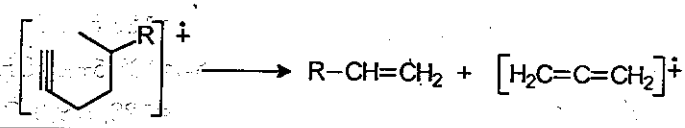


Trong xiclohexen thường có phản ứng Retro-Diels-Alder:



Bảng 3. Hợp chất loại ankin C≡C.

Vị trí	Xếp loại	Ghi chú
IR		Rất nét. Vắng ở hợp chất nối ba thế 2 lần. Tương tự có mặt OH, NH_2.
3300 cm^{-1}	≡CH ht	
2260-2100 cm^{-1}	C≡C ht	Thường nét, vắng ở hợp chất đối xứng cao. Tương tự: X≡Y, X=Y=Z.
700-600 cm^{-1}	≡C-H bd	Vắng ở hợp chất nối ba thế 2 lần. Không có giá trị thực tế.
UV		Thường có nhiều đỉnh hấp thụ yếu
210 nm		240 (lgε=1-2)
^{1}H-NMR	C≡C-H	$J_{CH-C\equiv CH}$ =2-3 Hz
2,0-3,2 ppm		CH_3-C≡CH 1,8 ppm
		-CH_2-C≡C 2,0 ppm
^{13}C-NMR	-C≡C-	≡C-H 65-80; ≡*C-C 70-90; -*C≡C-O- 20-35; -C≡*C-O- 85-95; ≡*C-C-S- 65-75
20-100 ppm		
MS	Ion phân tử	Yếu, vắng ở 1-ankinen
	Ion đặc trưng	m/e 39,53,67
	Chuyển vị	

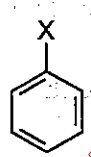
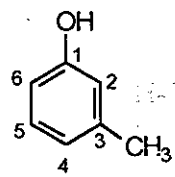


DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 10003 TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Bảng 4. Hợp chất loại thơm.

Vị trí	Xếp loại	Ghi chú
IR	Ar-H ht	Trong vùng này có dao động =C-H ht, HC-Hal ht, OH liên hợp ht.
3080-3030 cm^{-1}		
2000-1660 cm^{-1}	Dao động tổ hợp	Chỉ xuất hiện ở nồng độ cao
y		
1625-1575 cm^{-1}	Bộ xương	Các đỉnh tách ra. Đỉnh ở 1500 cm^{-1} đôi khi vắng, nhưng có cường độ cao hơn đỉnh ở 1600 cm^{-1}.
tb		
1320-950 cm^{-1}	Ar-H bd	Thường nhiều đỉnh, không có ý nghĩa giải phổ.
1450-1440 cm^{-1}	Bộ xương	
900-735 cm^{-1}	Ar-H bd (ngoài mặt phẳng)	1 đến 3 đỉnh. Có khả năng xác định loại thế (xem bảng 4a).
UV		Benzen: 255 nm (lgε=2,5)
205-260 nm (lgε=4)		Toluen: 262 nm (lgε=2,3)
		Phenol: 275 nm (lgε=3,7)
260-300 nm (lgε=2,5-3,5)		Anilin: 284 nm (lgε=3,2)
		Axit benzoic: 271 nm (lgε=2,9), 279 nm (lgε=2,7)
		Diphenyl: 250 nm (lgε=4,2)
		Naphtalen: 275 nm (lgε=3,8), 319 nm (lgε=1,0)
^{1}H-NMR	Ar-H	Hằng số tương tác spin-spin:
6,5-8,5 ppm		J_{ortho} = 7-10 Hz
		J_{meta} = 2-3 Hz
		J_{para} = 0-1 Hz
^{13}C-NMR		Tính độ chuyển dịch hóa học:
110-150 ppm		δ=128,5+ΣA_i (A_i : xem bảng 4.9 trang 98)
		
		δ_{C1}=128,5+A_1(OH)+A_m(CH_3)=
		=128,5+26,9+0=**155,4 ppm.**
		δ_{C2}=128,5+A_O(OH)+A_O(CH_3)=
		=128,5-12,7+0,8=**116,6 ppm.**
		δ_{C3}=128,5+A_1(CH_3)+A_m(OH) =
		=128,5+9,3+1,4=**139,2 ppm.**
		δ_{C4}=128,5+A_P(OH)+A_O(CH_3)=
		=128,5+9,3-7,3=**130,5 ppm.**

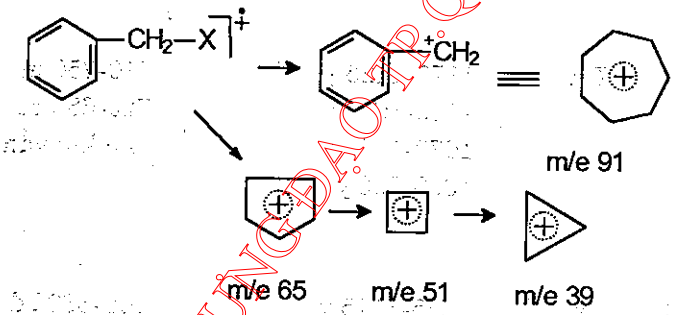
DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 10003 TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

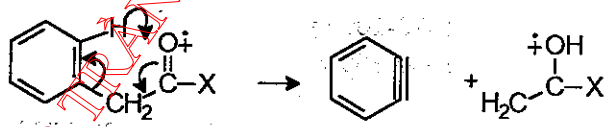
https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

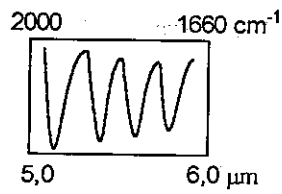
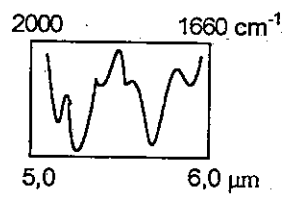
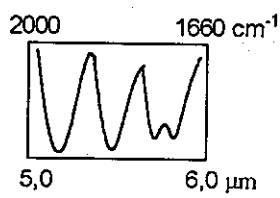
Bảng 4 (tiếp theo)

Vị trí	Xếp loại	Ghi chú
		δ_{C5}=128,5+A_m(OH)+A_m(CH_3)= =128,5-1,4+0=**129,9 ppm.**
		δ_{C6}=128,5+A_o(OH)+A_p(CH_3)= =128,5-12,7-2,9=**112,9 ppm.**
MS	Ion phân tử	Rất mạnh, thường là vạch cơ bản.
	Phân mảnh	m/e 39,51,65,66,75-78,90,91,92
	Chuyển vị	Ở các hợp chất thơm thế xuất hiện chuyển vị McLafferty:





Bảng 4a. Phổ hồng ngoại của benzen thế (cm^{-1})

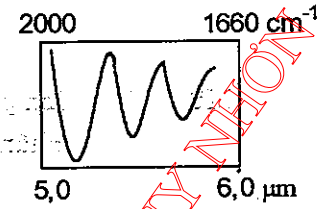
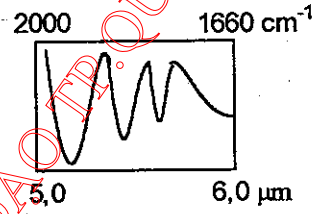
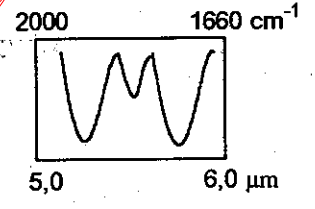
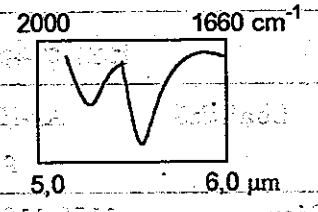
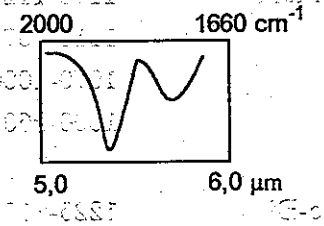
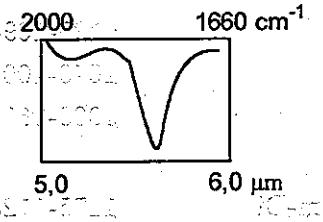
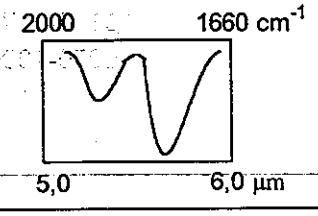
Loại thế	Ar-H bd (mặt phẳng)	Ar-H bd (ngoài mặt phẳng)	Dao động tổ hợp 2000-1660 cm^{-1}
Mono	1170-1125 y 1110-1070 y 1070-1000 y 1000-960 y	910-890 m (đôi khi vắng) 770-730 m 710-690 m	
o-Đi	1225-1175 y 1125-1090 y 1070-1000 y 1000-960 y	770-735 m	
m-Đi	1175-1125 y 1110-1070 y 1070-1000 y	900-860 bđ 810-750 m 725-680 bđ (đôi khi vắng)	

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 100% TRẦN HƯỞNG ĐẠO TP QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Bảng 4a (tiếp theo)

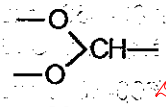
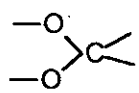
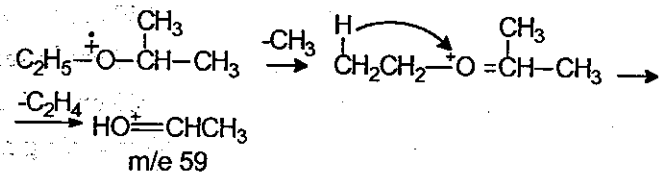
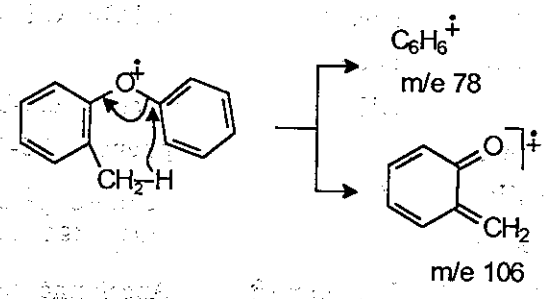
Loại thế	Ar-H bd (mặt phẳng)	Ar-H bd (ngoài mặt phẳng)	Dao động tổ hợp 200-1660 cm^{-1}
p-Đi	1225-1175 y 1125-1090 y 1070-1000 y 1000-960 y	860-800 m	
1,2,3-Tri	1175-1125 y 1110-1070 y 1070-1000 y 1000-960 y	810-750 m 725-680 bđ (đôi khi vắng)	
1,2,4-Tri	1225-1175 y 1175-1125 y 1125-1090 y 1070-1000 y 1000-960 y	900-860 bđ 860-800 m	
1,3,5-Tri	1175-1125 y 1070-1000 y	900-860 bđ 865-810 m 730-690 m	
1,2,3,4-Tetra		820-800 m	
1,2,3,5-Tetra		860-840 bđ	
Penta		900-860	

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Bảng 5. Hợp chất loại ete C-O-C.

Vị trí	Xếp loại	Ghi chú
1275-1020 cm^{-1} m	C-O ht	1150-1070 cm^{-1} -C-O-C- htb 1275-1200 cm^{-1} 1075-1020 cm^{-1} -C-O-C; Ar-O-C ht Trong vùng này còn có: C-O ht của ancol, axit cacboxylic, este, NO ht, C-S ht.
UV <210 nm		
^{1}H-NMR 3,3-4,0 ppm	CH_3-O -CH_2-O-	Đơn vạch CH_3OAr: 3,8 ppm, đơn vạch C-CH_2OAr: 4,1-4,6 ppm
^{13}C-NMR 40-70 ppm	CH_3O- -CH_2-O-	 90-100 ppm  95-105 ppm
MS	Ion phân tử	Mạch thẳng: nhỏ, $(M-1)^+$ thường mạnh. Thơm: mạnh
	Phân mảnh	m/e 31,45,59,73...14*n*-3 Vạch cơ sở ở ete mạch thẳng do phá vỡ ở vị trí α,β đối với nguyên tử oxi.
	Chuyển vị	Ở ete mạch thẳng, chuyển vị 1,3:  m/e 59 Ở ete mạch thơm, chuyển vị *ortho*:  m/e 78 m/e 106

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 100% BỞI TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Bảng 6. Hợp chất loại ancol, phenol.

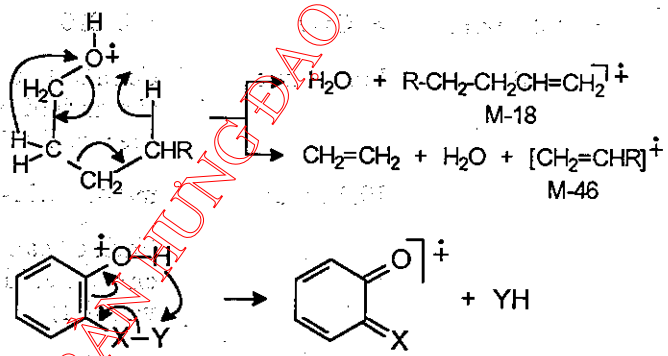
Vị trí	Xếp loại	Ghi chú
IR 3670-2500 cm^{-1}	OH ht	3670-3500 cm^{-1}, nhóm OH tự do, đỉnh nhọn (ghi trong dung môi ít phân cực CCl_4, $CHCl_3$). 3640 cm^{-1} : ancol bậc 1 3630 cm^{-1} : ancol bậc 2 3620 cm^{-1} : ancol bậc 3 3610 cm^{-1} : phenol 3550 cm^{-1} : axit cacboxylic 3600-3200 cm^{-1} : OH liên hợp ngoại phân tử, cường độ phụ thuộc vào nồng độ 3600-3450 cm^{-1} : OH đime, đỉnh nhọn 3400-3200 cm^{-1} : OH polime, đỉnh rộng 3600-3500 cm^{-1} : OH liên hợp nội phân tử khép vòng càng cua. Cường độ không phụ thuộc vào nồng độ 3600-3500 cm^{-1} : O-H...O-H 3200-2500 cm^{-1} : OH...O=C, đỉnh thường khó nhận Trong vùng này còn có NH ht, CH ht
1500-1250 cm^{-1}	OH bd (trong mặt phẳng)	Không có ý nghĩa thực tế.
1300-1000 cm^{-1}	C-O ht	Rất rõ. Rất nhạy đối với mạch nhánh, nhóm thế và nối đôi ở vị trí α. 1250 cm^{-1} : axit cacboxylic 1200 cm^{-1} : phenol 1150 cm^{-1} : *tert*-ancol 1100 cm^{-1} : *sec*-ancol 1050 cm^{-1} : ancol bậc 1 Trong vùng này còn có: C-O ht của este, ete, NO, C=S.
UV		
λ_{max}<210 nm	ancol	CH_3OH, C_2H_5OH: dung môi đo phổ tử ngoại.
λ_{max}>250 nm	phenol	
^{1}H-NMR 0,5-16 ppm	OH	ancol 0,5-5,5 ppm phenol 4,5-7,0 ppm
^{13}C-NMR 50-70 ppm	-C-O	CH_3—CH_2—CH_2—CH_2—OH 13,7 19,3 31,9 65,7
MS	Ion phân tử	Ancol: nhỏ, thường vắng ở ancol bậc 1 và nhánh. trong trường hợp này xuất hiện M-18 và M-15. Phenol: rõ, nhưng vạch $(M-1)^+$ còn hiện rõ hơn.

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON
DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP.QUY NHƠN

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Bảng 6 (tiếp theo).

Vị trí	Xếp loại	Ghi chú
	Phân mảnh	Ancol: m/e=31,45,59, M-46, M-33, M-18
		Ancol bậc 1: m/e=31,45,59
		Ancol bậc 2: m/e=31,45,59
		Ancol bậc 3: m/e=31,45,59
	Chuyển vị	Ancol: tách nước M-18
		Phenol: nhóm thế *ortho* thuận lợi cho chuyển vị McLafferty



Bảng 7. Hợp chất loại andehit -CH=O.

Vị trí	Xếp loại	Ghi chú
IR		
2880-2650 cm^{-1}	-CH=O ht	Thường có 2 đỉnh ở 2820 cm^{-1} và 2720 cm^{-1}. Trong vùng này còn có : CH_3 ht, CH_3N ht, -O-CH_2-O ht
1730-1650 cm^{-1}	C=O ht	1730 cm^{-1} : andehit thẳng
		1700 cm^{-1} : andehit thơm
		1690 cm^{-1} : andehit không no
		1675 cm^{-1} : andehit không no
		1660 cm^{-1} : H-C=O...H
		Trong vùng này còn có: C=O ht của các hợp chất cacbonyl khác.
1440-1160 cm^{-1}		Thường nhiều đỉnh, không có ý nghĩa thực tế.
UV	$n \rightarrow \pi^*$	Do cường độ nhỏ thường khó quan sát
270-300 nm ($lg\varepsilon$=1-1,5)	$\pi \rightarrow \pi^*$	Andehit không no α, β
		210-235 nm ($lg\varepsilon$=3,7-4,3)
		310-325 nm ($lg\varepsilon$=1-1,8)
		Andehit thơm (một nhân thơm)
		250 nm ($lg\varepsilon$=4-4,5)
		280 nm ($lg\varepsilon$=3) thường bị đỉnh 250 nm che lấp

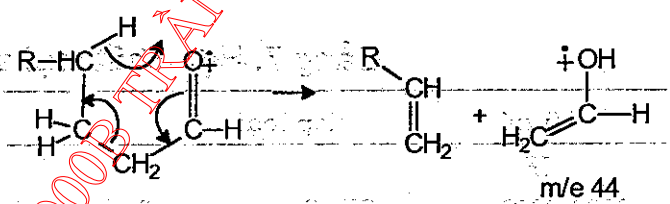
DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 10000 TRẦN HƯNG ĐẠO TP QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

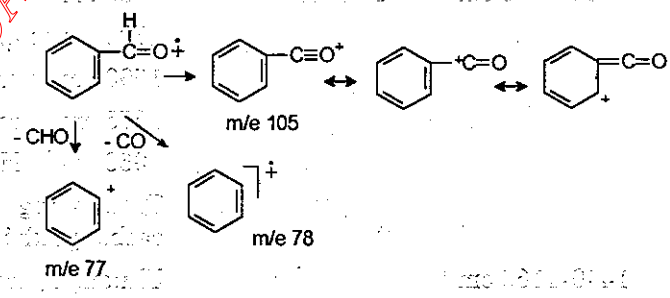
WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Bảng 7 (tiếp theo).

Vị trí	Xếp loại	Ghi chú
^{1}H-NMR		
2,0-2,5 ppm	-CH_2-C=O	$J_{CH_3-CH=O}$=1-3 Hz
9,4-11,0 ppm	-CH=O	Andehit không no
		H-C=C-C=O 6,5-7,2 ppm
		Andehit thơm
^{13}C-NMR		R-CH=O >C=C-*CH=O
180-220 ppm	>^{13}C=O	195-210 185-210
MS	Ion phân tử	Có mặt ở các andehit mạch thẳng với cường độ nhỏ, còn andehit thơm có cường độ mạnh, thường kèm theo vạch $(M-1)^+$.
	Phân mảnh	m/e=M-1,M-18,M-28...
		Vạch cơ bản ở andehit thẳng thường xuất hiện qua chuyển vị McLafferty, ở andehit thơm chủ yếu là M^+ và $(M-1)^+$.
	Chuyển vị	Andehit mạch thẳng có chuyển vị McLafferty:



Andehit thơm:

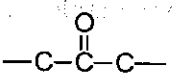
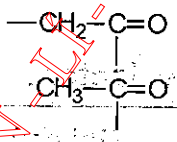
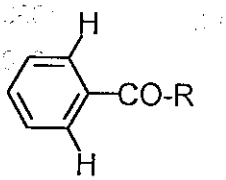
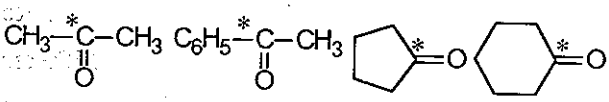


DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 10000 TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Bảng 8. Hợp chất loại xeton -C-C(=O)-C-.

Vị trí	Xếp loại	Ghi chú
IR		
1780-1550 cm^{-1}	>C=O ht	
m		1780-1700 cm^{-1} 
		1780 cm^{-1} : xeton vòng 4
		1745 cm^{-1} : xeton vòng 5
		1735 cm^{-1} : α-halogenxeton
		1720 cm^{-1} : α-dixeton, đôi khi có 2 đỉnh
		1715 cm^{-1} : xeton mạch thẳng no, xeton vòng 6
		1705 cm^{-1} : xeton vòng 7
		1675 cm^{-1} : α-dixeton enol hoá
		1650 cm^{-1} : β-dixeton enol hoá
		1615 cm^{-1} : β-dixeton vòng càng cua
		C=C ht 1605 cm^{-1}
		Trong vùng này còn có: C=O ht của hợp chất cacbonyl, C=C ht, C=N ht, NO ht
1325-1075 cm^{-1}		Thường có nhiều đỉnh, không có ý nghĩa thực tế.
bđ		
UV	$n \rightarrow \pi^*$	Do cường độ hấp thụ nhỏ nên ít quan sát thấy.
270-300 nm		Xeton α, β-không no cho hấp thụ ở:
(lgε=1-1,5)		210-235 nm (lgε=3,7-4,3) tương ứng $\pi \rightarrow \pi^*$
		310-325 nm (lgε=1-1,8) tương ứng $n \rightarrow \pi^*$
		Xeton thơm chứa 1 nhân thơm: 250 nm (lgε=4-4,5), 289 nm (lgε=3) thường bị che lấp bởi đỉnh 250 nm.
^{1}H-NMR		Đơn vạch
2,0-2,5 ppm		Xeton không no:
		H-C=C-C=O 6,5-7,2 ppm
		Xeton thơm:
		~8ppm
^{13}C-NMR		
195-255 ppm	>C=O	
		204,1 ppm 196,4 ppm 214 ppm 209 ppm

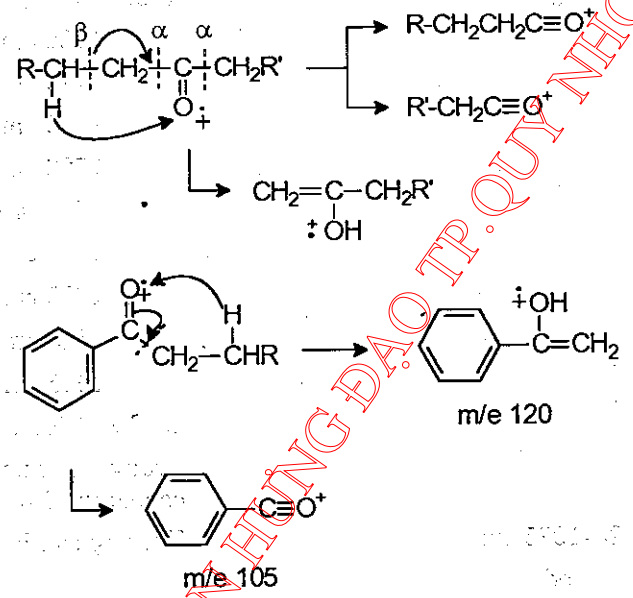
DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 10003 TRẦN HƯNG ĐẠO P. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

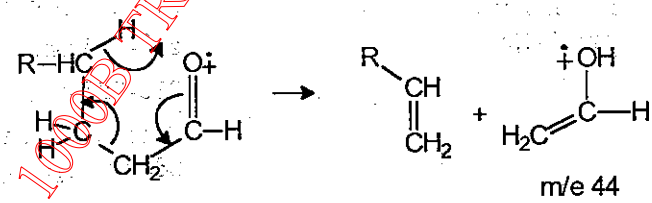
WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Bảng 8 (tiếp theo).

Vị trí	Xếp loại	Ghi chú
MS	Ion phân tử	Có mặt ở xeton thơm rất mạnh.
	Phân mảnh	Phá vỡ liên kết của nhóm cacbonyl ở vị trí α và β:



	Chuyển vị	ở xeton mạch thẳng có chuyển vị McLafferty:



Bảng 9. Hợp chất loại este, lacton.

Vị trí	Xếp loại	Ghi chú
IR		
1880-1635 cm^{-1}	>C=O ht	1880-1760 cm^{-1} : lacton không no
m		1830-1740 cm^{-1} : lacton no
		1770 cm^{-1} : vinyleste, phenol este
		1745 cm^{-1} : α-xetoeste, ArCOOAr
		1735 cm^{-1}: este mạch thẳng, β-lacton, β-xetoeste
		1720 cm^{-1} : este α,β-không no
		Trong vùng này còn có: C=O ht của hợp chất cacbonyl khác, C=C ht, C=N ht, NO ht.

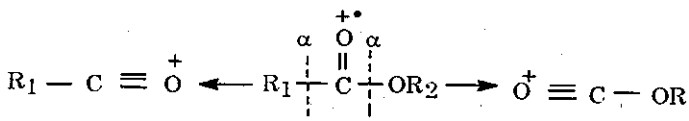
DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 100% TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

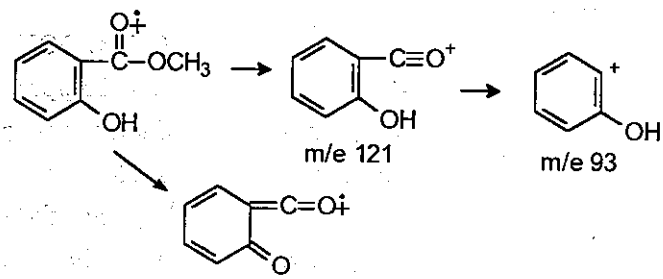
https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

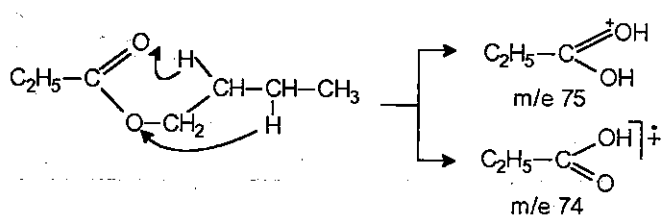
Bảng 9 (tiếp theo).

Vị trí	Xếp loại	Ghi chú
1300-1050 cm^{-1}	C-O ht	2 đỉnh mạnh của C-O htđ và C-O htb, vị trí gần đúng của dao động htb: 1260 cm^{-1} : este không no, este thơm 1240 cm^{-1} : axetat 1210 cm^{-1} : vinyleste, phenol este 1185 cm^{-1} :focmiat,propionat,este mạch thẳng cao 1180 cm^{-1} : β-lacton 1165 cm^{-1} : metyl este Trong vùng này còn có: C-O ht của ancol,ete, axit cacboxylic, NO ht, C-S ht, C-F ht.
UV		Este của axit không no 230 nm (lgε=4)
ngoài 210 nm		Este của axit no
^{1}H-NMR		So sánh:
2,1-2,6 ppm	CH_3COO este của axit no	CH_3COO^-: 2,0-2,6 ppm (singlet)
4,0-4,5 ppm	CH_2COOC	CH_2COOC : 3,5-4,0 ppm (singlet)
^{13}C-NMR		-COOR C=C-*COOR C_6H_5-*COOR
165-190 ppm	-COOR	165-185 ppm 175-190 ppm 165-167 ppm
MS	Ion phân tử	Mạnh
	Phân mảnh	ở liên kết α:





Chuyển vị



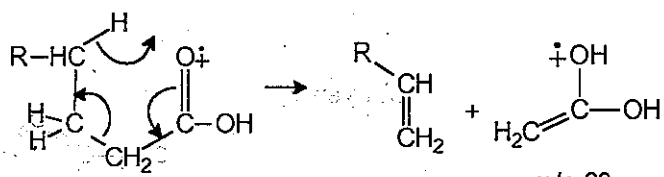
DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 100% TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Bảng 10. Hợp chất loại axit cacboxylic C-COOH.

Vị trí	Xếp loại	Ghi chú
IR	OH ht	Liên hợp: hai đỉnh hay một nhóm đỉnh đặc trưng ở 3100-2900 cm^{-1}. (chân rộng 3.550 - 2500)
3550-2500 cm^{-1}		Tự do: 3550 cm^{-1}.
y		Trong vùng này còn có dao động của OH ht (ancol/phenol), NH ht.
1760-1690 cm^{-1}	C=O ht	Đime, monome ở xấp xỉ 1760 cm^{-1}
m		Axit thơm và không no ở 1720 cm^{-1}
		Cacboxylat COO^- có:
		C=O htb ở 1620-1520 cm^{-1}
		C=O htđ ở 1520-1370 cm^{-1}
		Anhidrit 2 đỉnh:
		1870-1780 cm^{-1}
		1790-1725 cm^{-1}
		Halogenua axit:
		1800-1750 cm^{-1}
1300-1200 cm^{-1}	C-O st	Không có ý nghĩa thực tế.
m		
920 cm^{-1}	OH bd (ngoài mặt phẳng)	
tb		Rộng, đặc trưng cho axit cacboxylic.
UV		Axit α,β-không no: 230 nm (lgε=3-4)
ngoài 210 nm		
^{1}H-NMR		
2,1-2,5 ppm	CH_3COO	
9,5-13 ppm	-COOH	
^{13}C-NMR		$-CH_2-C^*OOH$ $C=C-C^*OOH$ $C_6H_5C^*OOH$
165-190 ppm	-COOH	165-185 ppm 165-175 ppm 173,5 ppm
MS	Ion phân tử	Mạch thẳng: có thể nhận biết. Hợp chất thơm:mạnh.
	Phân mảnh	Mạch thẳng: m/e=31,44,45,M-18,M-17
		Hợp chất thơm: m/e=M-45,M-44,M-17
	Chuyển vị	Mạch thẳng: chuyển vị McLafferty:



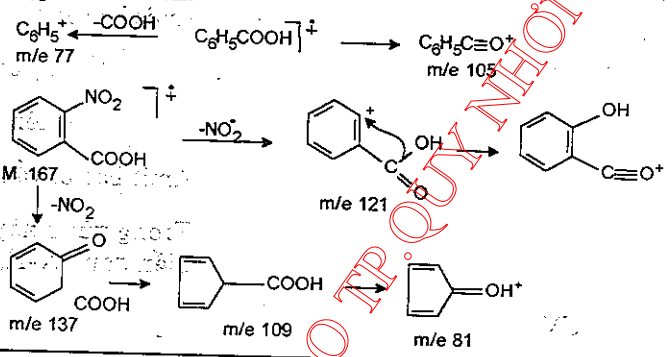
m/e 60

DIỄN ĐÀN TOÁN LÍ - HÓA 10000 TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Bảng 10 (tiếp theo).

Vị trí	Xếp loại	Ghi chú
		Hợp chất thơm: 

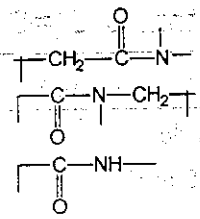
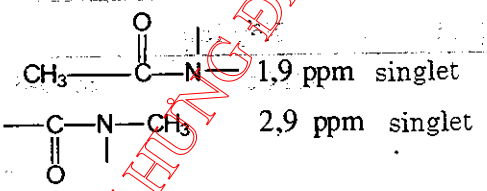
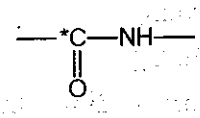
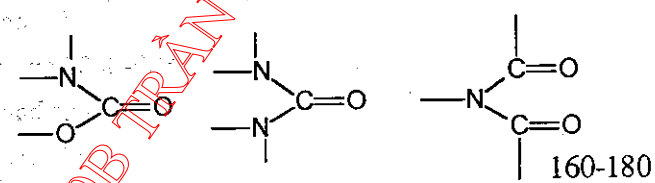
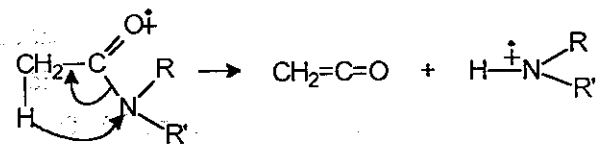
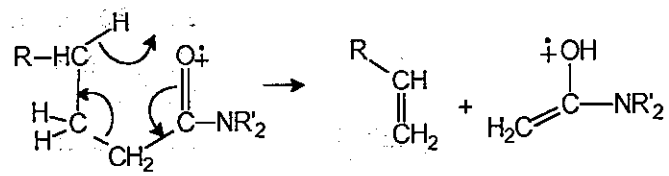
Bảng 11. Hợp chất loại amit, lactam C-C(=O)-N.

Vị trí	Xếp loại	Ghi chú
	NH ht	3500-3400 cm^{-1}: tự do amit bậc 1: 2 đỉnh amit bậc 2: 1 đỉnh amit bậc 3: vắng
		3300-3000 cm^{-1}: liên hợp amit bậc 1: nhiều đỉnh ở 3200-3000 cm^{-1} amit bậc 2: 2 đỉnh ở 3300 và 3070 cm^{-1} amit bậc 3: vắng lactam : 2 đỉnh ở 3175 và 3070 cm^{-1} Trong vùng này còn có dao động hoá trị của OH (ancol/phenol), NH, CH
1690-1530 cm^{-1}	Amit I	Amit bậc 1: tự do: 1690 cm^{-1} liên hợp: 1650 cm^{-1} Amit bậc 2: tự do: 1680 cm^{-1} liên hợp: 1655 cm^{-1} Amit bậc 3: vắng Trong vùng này còn có dao động của C=C, C=O, C=N và C=S.
	Amit II	Amit bậc 1: tự do: 1600 cm^{-1} liên hợp: 1640 cm^{-1}

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000E TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Vị trí	Xếp loại	Ghi chú
		Amit bậc 2: tự do: 1530 cm^{-1} liên hợp: 1550 cm^{-1} Amit bậc 3: vắng Trong vùng này còn có dao động của C=C nhân thơm, biến dạng N-H, C=O...H và NO.
UV		
chỉ có ở vùng <210 nm		Amit của axit không no α, β: < 230 nm (lgε=3-4)
^{1}H-NMR		Ví dụ: 
2,0-2,6 ppm		1,9 ppm singlet
3,2-3,8 ppm		2,9 ppm singlet
5,0-8,5 ppm		
^{13}C-NMR		
160-170 ppm		150-160 150-170 160-180
MS	Ion phân tử	Có mặt ở amit thơm, mạnh, nếu số nguyên tử nitơ trong phân tử lẻ thì M lẻ.
	Phân mảnh	Phân mảnh thuận lợi: 
	Chuyển vị	Chuyển vị 1,3 và McLafferty: 

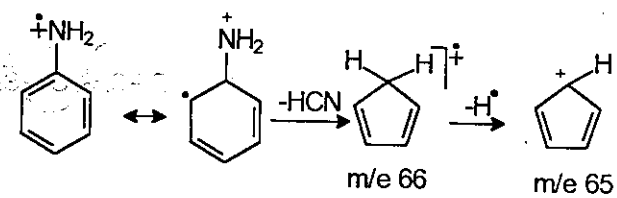
DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 10,11,12B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

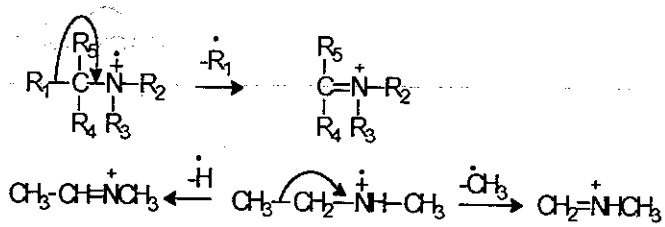
https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Bảng 12. Hợp chất loại amin C-N<.

Vị trí	Xếp loại	Ghi chú
IR		
3500-3100 cm^{-1}	NH ht	Amin bậc 1: 2 đỉnh ở 3500 và 3400 cm^{-1} Amin bậc 2: 1 đỉnh Amin bậc 3: vắng
1640-1490 cm^{-1}	NH bd (mặt phẳng)	Amin bậc 1: 1560 cm^{-1} Amin bậc 2: 1580 cm^{-1} Amin bậc 3: vắng Trong vùng này còn có dao động của C=C, nhân thơm, C=N, N=N
1360-1030 cm^{-1}	C-N ht	Không có ý nghĩa thực tế, amin thơm có 2 đỉnh.
900-650 cm^{-1}	N-H bd (ngoài mặt phẳng)	Rộng, không có ý nghĩa thực tế, vắng ở amin bậc 3.
UV		
220 nm (lgε=2,5)	Amin no	Không có ý nghĩa thực tế.
^{1}H-NMR		
2,2-2,7 ppm	CH_2-N	Ví dụ: CH_3-N< 2,3 ppm, vạch đơn
0,5-6,0 ppm	C-NH	Phụ thuộc dung môi (vạch rộng)
^{13}C-NMR		$CH_3—CH_2—CH_2—CH_2—NH_2$
25-50 ppm	$C-NH_2$	13,5 28 36 41,5
MS	Ion phân tử	Amin thơm: mạnh. Amin thẳng: vắng. Nếu số nguyên tử nitơ lẻ, M lẻ.
	Phân mảnh	Amin thẳng: m/e=30, nhiều ion chẵn. Phân mảnh thuận lợi: R-N-C Amin thơm:
	Chuyển vị	



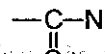


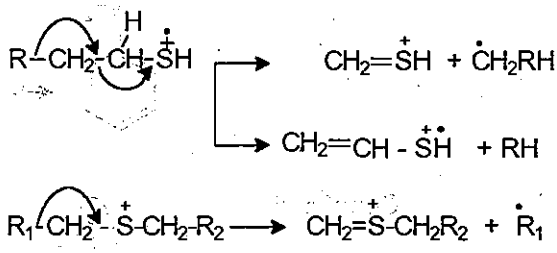
DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 10003 TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Bảng 13. Hợp chất chứa -SH, >C=S, -C-S-C-

Vị trí	Xếp loại	Ghi chú
IR		
2600-2550 CM^{-1}	S-H ht	Số sóng thấp khi liên hợp
1200-1050 cm^{-1}	C=S ht	S=C-N 1550-1460 cm^{-1} tương ứng amit II
		1300-1100 cm^{-1} tương ứng amit I
800-750 cm^{-1}	C-S ht	
500-450 cm^{-1}	S-S ht	So sánh : $-CH_2-S$ 2700-2630 cm^{-1}
		1420 cm^{-1}
800-570 cm^{-1}	C-S ht	
500-450 cm^{-1}	S-S ht	CH_3-S 1325-1300 cm^{-1}
UV		
250 nm (lgε=1,5)	$n \rightarrow \pi^*$	250 nm (lgε=1,5)
^{1}H-NMR		Thienol: 3-5 ppm
1-2 ppm	S-H	So sánh: CH_3S 2,0-2,4 ppm
		CH_2S 2,4-3,0 ppm
^{13}C-NMR		$^1CH_3-^2CH_2-S$ δ_{C1}=26,5 ppm, δ_{C2}=15 ppm
25-30 ppm	C-S	
MS	Ion phân tử	Có mặt đặc trưng, vạch isotop ở M+2
	Phân mảnh	m/e=33,34,47,48,61,75...M-34
	Chuyển vị	Tương tự như ở hợp chất oxi:

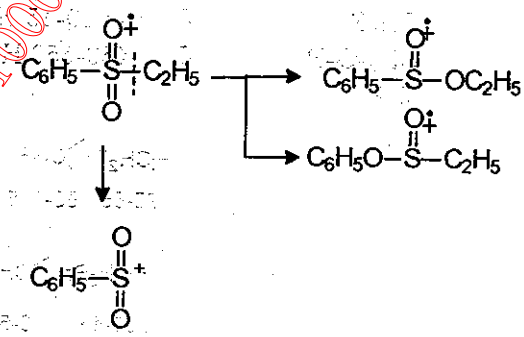


DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 0000 TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Bảng 14. Hợp chất chứa S, O.

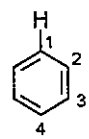
Vị trí	Xếp loại	Ghi chú
IR		
1400-1310 cm^{-1}	SO_2 hta	
1230-1040 cm^{-1}	SO_2 hts	
	S=O ht	
900-700 cm^{-1}	S-O ht	
UV		>SO_2 <210 nm
230 nm		>SO 210-230 nm (lgε=3,6)
^{1}H-NMR		
2,8 ppm	$-CH_2-SO-$	
2,5-3,5 ppm	$-CH_2SO_2-$	$-CH_2SO_2$ 2,5 ppm, đơn vạch
^{13}C-NMR		17,3 CH_3 19,8 CH_2S 14,8 $(CH_3$ 25,5 $CH_2)_2S$ $CH_3CH_2-S-S-CH_2-CH_3$ 32,8 14,5
50-55 ppm	C-S=O	$-CH_2-S=O$ 54 ppm, $-CH_2-SO_2$ 51 ppm
MS	Ion phân tử	Vạch isotop đặc trưng ở M-2
	Chuyển vị	

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 10000 TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Bảng 15. Hợp chất chứa C, P, O, N và halogen.

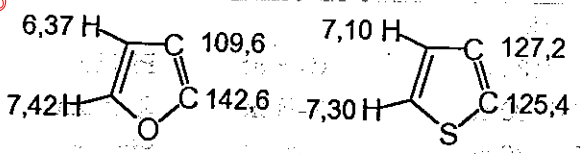
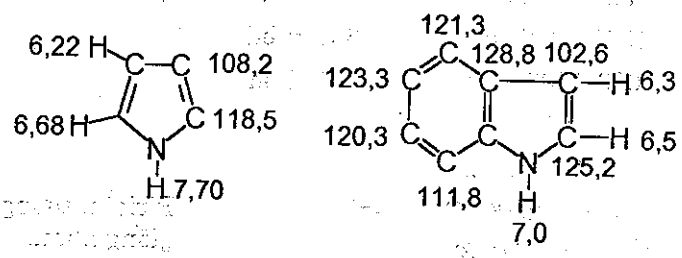
Vị trí	Xếp loại	Ghi chú
IR		
2440-2350 cm^{-1}	P-H ht	
1600-1500 cm^{-1}	NO ht	
	NO_2 hta	
1400-1300 cm^{-1}	NO_2 hts	
1300-1180 cm^{-1}	P-O ht	
1050 cm^{-1}	P-O-C hts	P-S 800-650 cm^{-1}
970-910 cm^{-1}	P-O-P	
750 cm^{-1}	P-O-C hts	Đỉnh rộng
1400-100 cm^{-1}	C-F ht	
800-500 cm^{-1}	C-Cl	
	C-Br	
	C-I	C-Cl 600 cm^{-1} C-Br 600 cm^{-1} C-I 500 cm^{-1}
UV		Đặc trưng đối với các hợp chất nitro thơm, phụ thuộc vào nhân thơm.
^{1}H-NMR		Thay đổi tuỳ thuộc vào nhóm thế:
2,6 ppm	CH_2I	J_{H-C}: 55 Hz
3,1 ppm	CH_2Br	$J_{H-C-C-F}$: 5-20 Hz
	CH_2Cl	J_{CH-O-P}: 10-15 Hz
	CH_2F	J_{H-F}: 450-550 Hz
4 ppm	CH_2-O-P	
7 ppm	H-P	
^{13}C-NMR δ, ppm		$-CH_2F$ 75-85; $>CHF$ 90-105; $-CF_3$ 115-125; $-CH_2Cl$ 40-55; $>CHCl$ 45-60; $-\overset{\vert}{C}Cl$ 65-80; $-CCl_3$ 90-105 $-CH_2Br$ 25-45; $>CHBr$ 40-55; $-\overset{\vert}{C}Br$ 55-70; $-CH_2I$ -5-10; $>CHI$ 10-25; $-\overset{\vert}{C}I$ 30-45 $Br-\overset{1}{C}H=\overset{2}{C}H-CH_3$ ^{1}C 104,7 ^{2}C 132,7 *(trans)* ^{1}C 108,9 ^{2}C 129,4 *(cis)*  X=Cl X=Br X=I ^{1}C 134,3 122,4 94,4 ^{2}C 128,6 131,4 137,2 ^{3}C 129,8 129,3 129,9 ^{4}C 126,8 126,7 127,1
MS	Ion phân tử	Ar-NO_2: m/e 30,46 M-46, M-30, M - 17
	Phân mảnh	Dẫn xuất halogen : thay đổi flo: m/e 19, 20, M-19 clo: m/e 35/37, 36/38 , 19/51, M-36/38 iot: m/e 127,128, M-127 Dẫn xuất nitron (xem mục 5.6)

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 10003 TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Bảng 16. Hợp chất dị vòng thơm furan, thiophen, pirol, indol.

Vị trí	Xếp loại	Ghi chú
IR		
3400 cm^{-1}	N-H ht	pirol, indol.
3160-3100 cm^{-1}	C-H ht	
1580-1400 cm^{-1}	C=C ht	
1268-1015 cm^{-1}	C-H bd (vòng)	Indol: 1625,1600,1565,1520,725-710 cm^{-1}.
1010-650 cm^{-1}	C-H bd (ngoài mặt phẳng)	
UV		
λ_{max} (nm) / ε_{max}		
207 / 9100	Furan	Đặc trưng cho các hợp chất dị vòng thơm.
208 / 7700	Pirol	Nhóm thế liên hợp chuyển dịch về phía sóng dài.
231 / 7100	Thiophen	
215 / 35500	Indol	
267 / 6600		
287 / 4250		
(trong xiclohexan)		
^{1}H-NMR		
6-7,5 ppm	=C-H	
^{13}C-NMR		
108-142 ppm	=C-H	
Tương tác spin-spin		
^{1}H-^{1}H		
J=0,9-4,7 Hz		

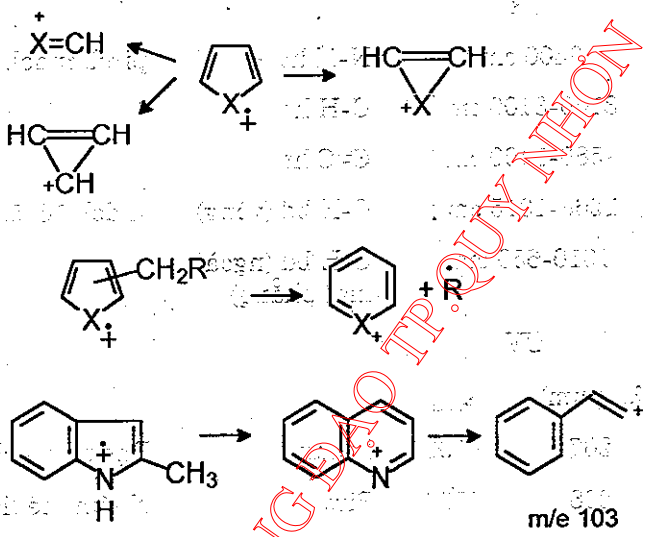
X	J_{23}	J_{34}	J_{24}	J_{25}
O	2,0	3,5	0,9	1,5
N	2,7	2,1	1,3	-
S	4,7	3,4	1,0	2,9

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Bảng 16 (tiếp theo).

Vị trí	Xếp loại	Ghi chú
MS	Ion phân tử	Xuất hiện mạnh.
	Cơ chế phân mảnh	

Bảng 17. Hợp chất dị vòng thơm piridin và quinolin.

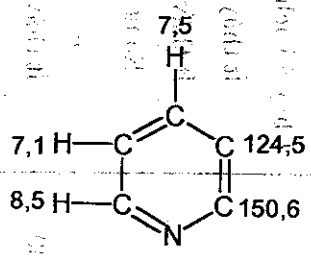
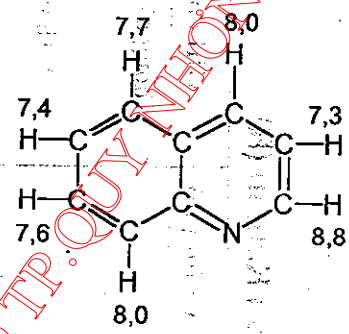
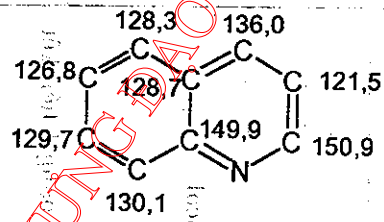
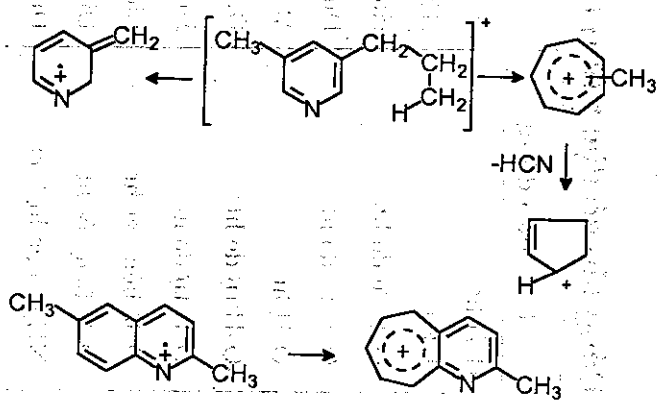
Vị trí	Xếp loại	Ghi chú
IR		
3100-3135 cm^{-1}	C-H ht	Piridin
3050-3100 cm^{-1}	C-H ht	Quinolin
1585-1430 cm^{-1}	C=C ht	Piridin
1620-1350 cm^{-1}	C=C ht	Quinolin
1037-1326 cm^{-1}	β C-H bd	
600-1000 cm^{-1}	γ C-H bd	
UV		
λ_{max}(nm) (ε_{max}):		
*235(3,0);230(3,1)	π-π^*	Piridin, tương tự phổ benzen do hệ thống điện tử π giống nhau.
246(3,3);250(3,3);		
257(3,4);263(3,3);		
*228(4,4);232(4,4)	π-π^*	
275(3,5);305(3,4);		Quinolin, tương tự phổ naphtalen.
315(3,4)		

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 9000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Bảng 17 (tiếp theo).

Vị trí	Xếp loại	Ghi chú
^{1}H-NMR 7,0-8,8 ppm	=C-H*	 
^{13}C-NMR 120-150 ppm	=*C-H	
Tương tác spin-spin ^{1}H-^{1}H J=1-7,5 Hz	Piridin: J_{23}=5,5; J_{34}=7,5; J_{24}=1,9; J_{35}=1,6; J_{26}0,4; J_{25}=0,9	
MS	Ion phân tử	Xuất hiện, cường độ trung bình.
	Cơ chế phân mảnh	

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org

Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú

WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

Bảng 18. Bảng tần số đặc trưng nhóm chức trong hồng ngoại (IR) và Raman (R).

Tần số, cm^{-1}	Loại phổ	Loại dao động	Dạng hợp chất	Cường độ	Ghi chú
4400	R	H-H ht	H_2 (khí)	-	Không có ở IR
3950	IR	H-F ht	HF (khí)	-	-
3687	IR	-O-H tự do ht	Hơi monoancol	-	Ít thấy
3636-3610	IR	-O-H tự do ht	Dung dịch loãng của monoancol	-	,,
3636-3150	R	-O-H ht	Muối hidrat	-	1 hay 2 vạch rộng
3634-3619	IR	-O-H tự do ht	Dung dịch loãng của điol	-	Ít thấy
3623	IR	-O-H tự do ht	Đime của ancol được liên kết bằng 1 liên kết	-	Ít thấy
3602-3544	IR	-O-H liên kết ht	Liên kết hidro nội phân tử	-	Rộng
3544-3502	IR	-O-H liên kết ht	Đime của ancol có mạch phân nhánh	-	,,
3530	IR	$-NH_2$ tự do ht kđx	Dung dịch loãng của các amit bậc 1	130	Ít thấy
3520	IR	-O-H tự do ht	Dung dịch loãng của axit cacboxylic trong CCl_4	-	,,
3500	IR	-O-H liên kết ht	Xetoancol, oxieste	-	-
3500-3495	IR	-O-H liên kết ht	Đime của ancol với 1 liên kết	-	Rộng, đôi khi 2 vạch
3500	IR	$-NH_2$ tự do ht kđx	Dung dịch loãng của các amin bậc 1	-	-
3500	IR	NH tự do ht	N-Arylamit bậc 2	-	-
3500-3400	IR	NH tự do ht	Amin bậc 2		Cường độ dao động trong khoảng rộng

DIỄN ĐÀN TOÁN-LÍ-HÓA 100B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON
https://tieulun.hopto.org
WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú

Bảng 18 (tiếp theo).

Tần số,cm^{-1}	Loại phổ	Loại dao động	Dạng hợp chất	Cường độ	Ghi chú
3498	IR	-NH_2 liên kết ht	Amit bậc 1	m	Các vạch yếu hơn ở 3345,3300 và 3180
3470-3410	IR	-NH_2 liên kết ht	Amin bậc 1	-	Rộng
3470-3400	IR	-NH tự do ht	Dung dịch loãng của amit bậc 2 trong $CHCl_3$	-	-
3415	IR	-NH_2 ht đx	Dung dịch loãng của amit bậc 1	120	-
3400	IR	-NH_2 tự do ht đx	Dung dịch loãng của amit bậc 1	-	-
3400	IR	>C=O ht hoạ âm	-	y	-
3374	IR	≡C-H	Axetilen (khí)	-	Không có trong IR
3360-3320	IR	-C-N=O ht hoạ âm	Hợp chất nitrozo	-	-
3356	IR	-O-H liên kết ht	Ancol, liên kết cầu hiđro	m	-
3345	IR	-NH_2 liên kết ht	Amit bậc 1	-	Các vạch khác ở 3498,3300 và 3180
3300	IR	-NH_2 liên kết ht	Amit bậc 1	-	Các vạch khác ở 3498,3345 và 3180
3312	IR	≡C-H ht	HCN	-	
3305-3270	IR, R	≡C-H ht	Axetilen thế mono	100	
3300-3280	IR	-NH liên kết ht	Amit thế N-mono	-	Cũng có ở polipeptit và protein
3287	IR	≡C-H ht kđx	Axetilen (khí)	-	Không có trong phổ Raman
3200-2500	IR	-O-H liên kết ht	Đime của axit cacboxylic, hợp chất phức nội,v.v...	-	Rất rộng
3182	IR	-NH_2 liên kết ht	Amit bậc 1	m	Các vạch khác ở 3498,3345,3300

ĐỀ CƯƠNG ÔN TẬP LÍ - HÓA 10 CB TRẦN HƯNG ĐẠO TP.QUY NHƠN

WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

https://tieulun.hopto.org

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú

https://tieulun.hopto.org

WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

ĐIỂM ĐAN TOÁN-LÍ HÓA 1800B TRẦN HƯNG ĐẠO TP.QUY NHƠN

Bảng 18 (tiếp theo).

Tần số, cm^{-1}	Loại phổ	Loại dao động	Dạng hợp chất	Cường độ	Ghi chú
3108	R	=C-H ht	Etilen (khí)	-	Không có ở IR
3106	IR	=C-H ht	Etilen (khí)	-	Không có trong phổ Raman
>3100	IR	=C-H ht	-O-C=CH_2	-	-
3100	IR	-O-H liên kết ht	Muối hiđrat	-	Rộng
3100-3070	IR	-NH_3^+	Clohiđrat của aminoaxit	-	Rộng
3100-3060	IR	N-H liên kết ht	Amit thế N-mono	-	Cũng có ở polipeptit và protein
3100-3000	IR	=C-H ht	Hợp chất thơm	20-60	-
3099	IR	=C-H ht	Hơi benzen	-	-
3090-3080	IR	=C-H ht	RHC=CH_2	25-35	-
3085÷3075	IR	=C-H ht	RR'C=CH_2	25-30	-
3070-3045	R	=C-H ht	Benzen thế mono, đi và tri	m	-
3065÷3012	IR	CH_2 ht kđx	CH_2X_2 (X=halogen)	-	-
3062÷3047	R	C-H ht	Benzen	m	-
3060-2982	IR	-CH_3 ht kđx	CH_3X (X=halogen)	-	-
3040	IR	-CH_2 ht kđx	Vòng xiclopropan	-	-
3040-3030	IR	-C-H ht	CHX_3 (X=halogen)	-	-
3030-3010	IR	=C-H ht	RHC=CHR' *(cis)*	30-40	-
3027-3020	IR	=C-H ht	RHC=CHR' *(trans)*	30-40	-
3020	IR	-C-H ht	metan, khí	-	-

Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú

Bảng 18 (tiếp theo).

Tần số, cm^{-1}	Loại phổ	Loại dao động	Dạng hợp chất	Cường độ	Ghi chú
3019	R	=C-H ht	Etilen, khí	-	Không có trong phổ Raman
2988-2949	IR	CH_2 ht đx	CH_2X_2 (X=halogen)	-	-
2972-2964	IR	CH_3 ht đx	CH_3X (X=halogen)	-	-
2962	IR	CH_3 ht kđx	Hidrocacbon no	150	(trên mỗi nhóm CH_3)
2930-2920	IR	CH_3 ht kđx	Nhóm metyl gắn với vòng benzen	20	(trên mỗi nhóm CH_3)
2926	IR	CH_2 ht kđx	Hidrocacbon no	75	(trên mỗi nhóm CH_3)
2890	IR	C-H ht	Hidrocacbon no	ry	-
2880-2860	IR	CH_3 ht đx	Nhóm metyl gắn với vòng benzen	-	-
2872	IR	CH_3 ht đx	Hidrocacbon no	90	(trên mỗi nhóm CH_3). y ở -O-CH_3
2853	IR	CH_2 ht đx	Hidrocacbon no	45	(trên mỗi nhóm CH_3)
2820	IR	-CH_3 ht (?)	-O-CH_3 trong hợp chất béo	y	-
2800-2000	IR	$^+NH_3$, $^+NH_2$, ^+NH ht	Clohidrat của amin	-	-
2700-2560	IR	-O-H liên kết ht	Axit oxiphotphoric	-	y
2650-2400	IR	-O-D ht	Ancol đã đơteri hoá	-	-
2600-2550	IR	-S-H ht	Ankylmecaptan	-	y trong IR, m hơn trong phổ Raman
2440-2350	IR	-P-H ht	Axit oxiphotphoric	-	-
2329	R	-C≡N ht	Đixian	-	Không có ở IR
2304	R	-C≡C ht	Điankylaxetilen	-	Đỉnh thứ 2 ở 2227
2270	IR	-N=C=O ht kđx	Ankylisoxianat	1300-2000	-
2260-2190	IR	-C≡C- ht	Điankylaxetilen	1	Đôi khi 2 vạch

DIỄN ĐÀN HOÁ-LÍ-HỌA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP.QUY NHƠN

WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

https://tieulun.hopto.org

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Bảng 18 (tiếp theo).

Tần số, cm^{-1}	Loại phổ	Loại dao động	Dạng hợp chất	Cường độ	Ghi chú
2258	IR	-C-D ht	Tetradơterimetan	-	-
2250	IR, R	-C≡N ht	Nitrin không liên hợp	-	-
2240-2230	IR	-C≡N ht	Benzonitrin	-	-
2238	IR	-C≡N ht	$Co(CN)_2$	-	-
2227	R	-C≡C- ht	Điankylaxetilen	-	Đỉnh thứ 2 ở 2304
2225	IR, R	-C≡N ht	Nitrin liên hợp	-	-
2207-2202	IR	-C≡C- ht	Xicloaxetilen	-	-
2200	IR	-Si-H ht	Ankyl silan	rm	-
2200-2160	R	$-^{+}ND_3$	-	-	-
2187	R	-Si-H ht đx	Silan, khí	m	-
2183-2150	IR	-N≡C ht	Ankylisoxianua	-	-
2183	IR	-Si-H ht đx	Silan, khí	-	-
2169-2080	R	$-N=^{+}N=N^{-}$ ht kđx	Ankylaziđua	m	-
2168	IR	C=O ht	Cacbon oxit, khí	-	-
2150	IR	-C=C=O	Xeten	m	-
2149	IR	-C≡N ht đx	Đixian	-	Không có trong phổ Raman
2141	IR	$-N=^{+}N=N^{-}$ ht kđx	metyl aziđua	m	-
2140-2100	IR	-C≡C- ht	monoankylaxetilen	5	-
2125-2118	R	-C≡C- ht	monoankylaxetilen	rm	-
2123	IR	$-^{+}N≡C^{-}$	Phenylisoxianua	-	-

Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON
https://tieulun.hopto.org
ĐỀN ĐÁP TOÁN - LÍ - HÓA 100B TRẦN HƯNG ĐẠO TP.QUY NHƠN
WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú

WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

https://tieulun.hopto.org

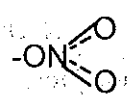
WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

DẠY KÈM TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

Bảng 18 (tiếp theo).

Tần số,cm^{-1}	Loại phổ	Loại dao động	Dạng hợp chất	Cường độ	Ghi chú
2089	IR, R	-C≡N	Axit xianhidric	-	-
2080	IR	C=O ht	$Fe_2(CO)_9$	-	-
2049	R	C=C=O ht	Xeten	m	-
2043	IR	C=O ht	$Fe(CO)_4$	-	-
2034	IR	C=O ht	$Fe_2(CO)_9$	-	-
2030	IR	C=O ht	$Ni(CO)_4$, $Fe(CO)_5$	-	-
2020	IR	-C=O ht	$Fe(CO)_4$	-	-
2000-1650	IR	Hoạ âm và tổ hợp	Dẫn xuất của benzen	1-10	Yếu, nhưng đặc trưng
1980	IR, R	-C=C=C- ht đx	Allen và dẫn xuất		Cường độ mạnh trong IR và Raman
1974	R	-C≡C- ht	Axetilen, khí	rm	-
1942	IR	-C=O ht	F_2CO	-	-
1835-1820	IR	=C-H bd hoạ âm	$RHC=CH_2$	-	-
1833	IR	-C=O ht	$Fe(CO)_4$	-	-
1828	IR	-C=O ht	$Fe_2(CO)_9$	-	-
1820-1650	IR, R	C=O ht	Hợp chất cacbonyl	250-1250	-
1790-1785	IR	=C-H bd hoạ âm	$RR'C=CH_2$	-	-
1750	IR	-P-D ht		-	-
1736	IR	-O-N=O ht hoạ âm	Ankyleste của axit nitrơ	-	-
1680-1650	IR	-N=O ht	Cấu hình *trans* của este của axit nitric	-	-

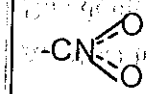
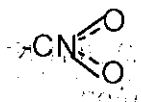
Bảng 18 (tiếp theo).

Tần số, cm^{-1}	Loại phổ	Loại dao động	Dạng hợp chất	Cường độ	Ghi chú
1680-1640	R, IR	-C=C- ht	-	-	Mạnh trong phổ Raman, yếu ở IR
1680-1630	IR	-C=N ht	-	m	-
1678-1668	IR	-C=C ht	RHC=CHR' *(trans)*		-
1675-1665	IR	-C=C ht	RR'C=CHR"	-	-
1675-1665	IR	-C=C- ht	RR'C=CR"R"'	-	Không có ở IR ở hợp chất thế đối xứng
1673	IR	-C=N- ht	R-CH=NR'	-	-
1670	IR	-C=N- ht	Hợp chất béo	-	-
1662-1652	IR	-C=C- ht	RHC=CHR' *(cis)*	5-10	Xiclohexen 1646
					Xiclopenten 1611
					Xiclobuten 1571
1658-1648	IR	-C=C- ht	$RR'C=CH_2$	30	-
1654	IR	-C=N- ht	Ar-CH=NR	-	-
1648-1638	IR	-C=C- ht	$RHC=CH_2$	25-45	-
1640	R	-O-N=O ht	Ankylnitrit	-	Metylnitrit 1603
1640	IR	-C=N- ht	azometin	-	Ở trạng thái rắn
1640-1628	IR	 ht kđx	Ankylnitrat	-	-
1640-1660	IR	$-NH_2$ hình kéo	Amin bậc 1	-	-

Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
https://tieulun.hopto.org
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON
DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 100B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN
WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú

Bảng 18 (tiếp theo).

Tần số, cm^{-1}	Loại phổ	Loại dao động	Dạng hợp chất	Cường độ	Ghi chú
1640-1535	IR	$-^{+}NH_3$ bd kđx	Clohidrat của aminoaxit	-	-
1640-1530	IR	-C=O ht	Hợp chất phức nội, β-đixeton, β-xetoeste	rm	Rộng
1637	IR	-C=N- ht	Ar-CH=NAr'	-	-
1630-1615	IR	H-O-H bd	Nước kết tinh trong muối hidrat, v.v...	-	-
1625-1610	IR	O-N=O ht	Ankyleste của axit nitrơ	-	-
1610-1590	IR, R	Dao động vòng	Hidrocacbon thơm	20-100	Mạnh trong phổ Raman
1590-1588	IR	-N-H bd (?)	Dung dịch loãng của ankylamin trong $CHCl_3$	180-210	Trong phổ của tinh thể chuyển dịch đến 1650-1620 (vạch "amit II")
1580-1490	IR	-N-H bd (?)	Ankylamin bậc 2	y	-
1580-1475	IR	-N-H bd	Amit không vòng thế ở N	-	Không có trong phổ Raman (vạch "amit II")
1577	IR	-N=N- ht	Hợp chất azo thơm	-	-
1576	IR, R	-N=N- ht			Cường độ yếu ở IR
1571	R	-C=C- ht	$Cl_2C=CCl_2$		Cường độ rất yếu ở IR
1570-1520	IR, R	 ht kđx	Ankylnitramin		
1562-1470	IR	C-N=O ht kđx	Hợp chất ankylnitrozo	-	-
1560	IR	-N-H bd (?)	Amit thế N-mono (ở trạng thái rắn)	-	-
1560	IR	 ht kđx	Hợp chất ankylnitro	-	-

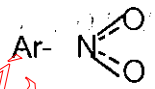
ĐIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

https://tieulun.hopto.org

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

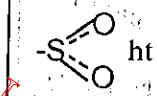
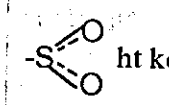
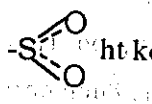
Bảng 18 (tiếp theo).

Tần số,cm^{-1}	Loại phổ	Loại dao động	Dạng hợp chất	Cường độ	Ghi chú
1540-1520	IR	-N-H bd (?)	Amit thế N-mono (trong dung dịch đioxan)	-	Vạch "amit II"
1520-1490	IR	$-^{+}NH_3$ bd đx	Clohidrat của aminoaxit	-	-
1518	IR		Hợp chất nitro thơm	-	-
1517	IR	Ar-N=O ht	Dẫn xuất nitrobenzen	-	-
1500-1480	IR	Dao động vòng	Hidrocacbon thơm	50-100	Yếu hay không có trong phổ Raman
1470-1420	IR	$-CH_3$ bd kđx	Dẫn xuất ankylbenzen	20-50	-
1467	IR	CH_2 hình kéo	mạch béo thẳng	8	(trên mỗi nóm CH_2)
1460	IR, R	$-CH_3$ bd kđx	Hidrocacbon béo	-	-
1455	IR, R	CH_2 hình kéo	Dẫn xuất xiclopentan	-	-
1452	IR, R	CH_2 hình kéo	Dẫn xuất xiclohexan	-	-
1450	IR	F-H-F ht	Ion HF_2	-	-
1450-1200	IR, R	C-H bd phẳng ở -C=C-H	Etilen thế		Cường độ mạnh trong phổ Raman yếu ở IR
1438-1436	IR	$-CH_3$ bd đx	Cacbometoxieste	100-150	-
1435-1405	IR	CH_2 hình kéo	$-CH_2-CO-$	-	-
1435-1420	IR	-C-OH ht (?)	Đime của axit cacboxylic	-	-
1434-1409	R	-N=C=O ht đx	Ankylisoxianat	m	-
1427-1420	IR	CH_2 hình kéo (?)	$-CH_2-COOR$	y	-
1420-1416	IR	-C-H bd phẳng ở -C=C-H	$RHC=CH_2$	10-20	-
1420-1410	IR	-C-H bd phẳng ở -C=C-H	$RR'C=CH_2$	ry	-

Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON
https://tieulun.hopto.org
DIỄN ĐÀN TOÁN-LÍ-HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP.QUY NHƠN
WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú

Bảng 18 (tiếp theo).

Tần số, cm^{-1}	Loại phổ	Loại dao động	Dạng hợp chất	Cường độ	Ghi chú
1411	R	 ht kđx	Cl_2SO_2	-	-
1410-1400	IR	C-H bd phẳng ở -C=C-H	RHC=CHR' *(cis)*	10-20	
1408-1351	IR	-N-N=O ht kđx	Ankylnitrozoamin	m	Cũng ở 1315,1160
1406-1393	IR	$-CH_3$ bd đx	Nhóm *tert*-butyl	-	Không có trong phổ Raman
1400	IR	 ht kđx	$ROSO_2Cl$	-	-
1400-1340	IR	-O-H bd	Ancol, v.v...	-	Tăng lên khi tạo thành liên kết hidro
1400-1300	IR	C=S ht	-	-	-
1390	R	Dao động của NO_3^-	Ion nitrat	-	-
1385-1375	IR	$-CH_3$ bd đx	Nhóm *gem*-đimetyl	-	Không có trong phổ Raman
1385-1380	IR	$-CH_3$ bd đx	Nhóm isopropyl	-	Không có trong phổ Raman
1385-1375	IR	$-CH_3$ bd đx	Dẫn xuất metylbenzen	10-20	Không có trong phổ Raman
1380	R	 ht kđx	$ROSO_2OR'$	-	-
1380-1378	IR	$-CH_3$ bd đx	Hhidrocacbon béo mạch thẳng	5	(trên mỗi nhóm CH_2). Không có trong phổ Raman

DIỄN ĐÀN TOÁN-LÍ-HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

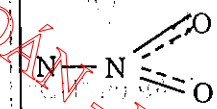
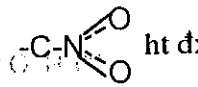
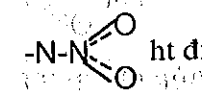
https://tieulun.hoptb.org

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

Bảng 18 (tiếp theo).

Tần số, cm^{-1}	Loại phổ	Loại dao động	Dạng hợp chất	Cường độ	Ghi chú
1380-1350	IR	Dao động của NO_3	Ion nitrat	-	-
1372-1366	IR	$-CH_3$ bd đx	Nhóm *gem*-đimetyl hay *tert*-butyl	-	-
1370	R	 h't đ	Ankylnitramin	-	-
1362-1360	IR	$-CH_3$ bd đx (?)	Cacbometoxieste	-	-
1360-1355	IR	$-CH_3$ bd đx	$-CO-CH_3$	-	-
1360-1330	R, IR	C-H bd	Hidrocacbon mạch phân nhánh	ry	-
1350	IR	-N=+N=N-	metyl aziđua	y	-
1350	IR	 ht đx	Hợp chất ankyl- và arylnitro	y	-
1350-1330	IR		Sunfamit thế N,N-đi	-	-
1350-1280	IR	-C-N- ht	ArNHR	-	-
1350-1200	IR	CF_2-CF_2 ht	Flohidrocacbon no	-	-
1350-1150	IR, R	CH_2 hình quạt và xoắn	mạch polimetilen		Vạch dao động xoắn yếu hay không có trong phổ IR. Tạo thành bậc trong phổ ở trạng thái rắn
1348-1177	R	-N=+N=N- ht đx	metyl aziđua	y	-
1340-1310	IR, R	 ht đx	Ankylnitramin	-	-

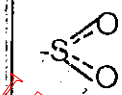
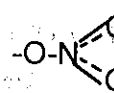
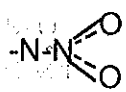
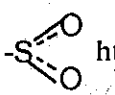
WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

https://tieulun.hopto.org

Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú

Bảng 18 (tiếp theo).

Tần số,cm^{-1}	Loại phổ	Loại dao động	Dạng hợp chất	Cường độ	Ghi chú
1335-1310	IR	 ht kđx	Ankylsunfon	250-600	-
1331	R	NO_2	Ion nitrit	-	-
1320	IR	NO_2	Ion nitrit	-	-
1315-1162	IR	-N-N=O	Ankylnitrozoamin	m	-
1306-1303	IR, R	CH_2 hình quạt	Hidrocacbon mạch không phân nhánh		Cường độ mạnh trong phổ Raman, yếu trong phổ IR
1300	IR	-	Dime của axit cacboxylic	-	-
1300-1250	IR	P=O ht	Các axit oxiphotphoric và este của chúng	-	-
1285-1260	IR, R	 ht đx	Ankylnitrat		Cường độ mạnh trong phổ Raman
1280-1270	IR	 ht đx	Ankylnitroamin	m	-
1280-1230	IR	-C-N- ht	ArNHR	-	-
1280-1150	IR	-C-O-C- ht kđx	Este, lacton,v.v...	500-1200	Yếu trong phổ Raman
1277	IR	-C-F ht	CF_4	-	-
1275-1200	R, IR	-C-O-C- ht kđx	Nhóm -C=C-O-C trong este,v.v...	m	-
1270	R	 ht kđx	RSO_2R'	-	-

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP.QUY NHƠN

WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

https://tieulun.hopto.org

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Bảng 18 (tiếp theo).

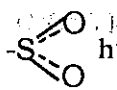
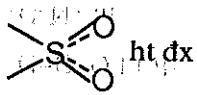
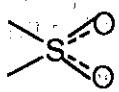
Tần số,cm^{-1}	Loại phổ	Loại dao động	Dạng hợp chất	Cường độ	Ghi chú
1268	IR, R	Dao động vòng đx	Oxit etilen		Cường độ mạnh trong phổ Raman
1265-1258	IR	-Si-CH_3	Silan,v.v...	m	-
1260	IR	-C≡C-H bd hoạ âm	-	-	-
1250	IR, R	Dao động con lắc của nhóm CH_3?	Nhóm *tert*-butyl		Cường độ mạnh trong phổ Raman. Cũng ở 1210-1200
1250-1180	IR	-C-N ht	$ArNR_1R_2$	-	-
1250-1175	IR	-P=O	Este thơm của axit oxiphotphoric	m	-
1240	R	NO_2^-	Ion nitrit	-	-
1240-1190	IR	-P-O-C- ht	Este thơm của axit oxiphotphoric	-	-
1230	R	-S=O ht	ClSOCl	-	-
1230-1130	IR	-C-N- ht	$(RCH_2)_3N$	-	-
1220	IR	NO_2^-	Ion nitrit	-	-
1216	R	-S=O ht	ClSOOR	-	-
1210-1200	IR, R	Dao động con lắc của nhóm metyl?	Nhóm *tert*-butyl	-	Cũng ở 1250
1205-1125	IR, R	-C-OH ht	Ancol bậc 3 béo no, ancol bậc 2 đối xứng cao	m	-
1200	R	-S=O ht	ROSOOR'	-	-
1200	IR	-	Ankylxeton	-	-
1200-1160	IR	-	Sunfonatri và sunfat	-	-
1200-1100	IR	-C-N- ht	$RR'CHNH_2$	-	-
1200-1100	IR	-C-N- ht	RR'CHNHCHR"R"'	-	-

DIỄN ĐÀN TOÁN-LÍ-HÓA 100% TRẦN HƯNG ĐẠO TP.QUY NHƠN
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON
https://tieulun.hopto.org
WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú

BIM ĐÁN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

Bảng 18 (tiếp theo).

Tần số,cm^{-1}	Loại phổ	Loại dao động	Dạng hợp chất	Cường độ	Ghi chú
1190	IR	-P-O- ht	$-P-OC_2H_5$	-	-
1190	R	ht đx	$ROSO_2Cl$	-	-
1190	R	 ht đx	$ROSO_2OR$	-	-
1190-1158	IR	ht khung	Xetal và axetal	-	-
1186	R	 ht đx	$ClSO_2Cl$	-	-
1186	R	Dao động vòng	Dẫn xuất xiclopropan	-	-
1180-1160	IR	-	Sunfamit thế N,N-đi	-	-
1175	IR, R	Dao động kđx của vòng	1,3,5-Trioxan	-	Cường độ mạnh ở phổ Raman
1170	IR, R	Dao động con lắc của nhóm metyl?	Nhóm isopropyl	-	-
1163-1156	IR	-P-O- ht	$-P-OCH_3$	-	-
1160-1130	IR	 ht đx	Ankylsunfon	500-900	-

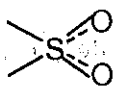
https://tieulun.hoptb.org

WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Bảng 18 (tiếp theo).

Tần số, cm^{-1}	Loại phổ	Loại dao động	Dạng hợp chất	Cường độ	Ghi chú
1155-1135	IR	Dao động con lắc của nhóm metyl	3-metylparafin	-	Vạch kép
1150-1080	IR	-C-N- ht	RCH_2NHCH_2R'	-	-
1150-1070	IR	-C-O-C- ht kđx	Ete béo	m	-
1143-1124	IR	ht khung	Xetal và axetal	-	-
1141-1132	IR	Dao động con lắc của nhóm metyl	Hidrocacbon béo có mạch không phân nhánh	4-5	-
1130	R	 ht đx	RSO_2R	-	-
1130-1120	IR, R	-C=C=O ht đx	Xeten và dẫn xuất ankyl	m	-
1130-1030	IR	-C-N- ht	$(RCH_2)_3N$	-	-
1125	IR, R	Dao động vòng kđx	1,4-Đioxan	-	-
1125-1085	IR, R	-C-OH ht	Ancol bậc 3 α-không no hay vòng ancol bậc 2 no	m	-
1122	IR	-C-O-C ht kđx	Đimetyl ete, hơi	-	-
1120-1030	IR	-C-N- ht	RCH_2NH_2	-	-
1116-1105	IR	ht khung	Axetal	-	Không có trong phổ của xetal
1100-1000	IR	Si-O ht	Siloxan	-	-
1100-1050	IR	ClO_4^-	Peclorat hữu cơ và vô cơ	-	-
1098-1075	IR	Dao động vòng kđx	Tetrahidrofuran	m	-
1098-1063	IR	ht khung	Xetal và axetal	-	-

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP.QUY NHƠN

Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
https://tieulun.hopto.org
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú

Bảng 18 (tiếp theo).

Tần số,cm^{-1}	Loại phổ	Loại dao động	Dạng hợp chất	Cường độ	Ghi chú
1097	IR	Dao động vòng kđx	Tetrahidropiran	m	-
1085-1050	IR, R	-C-OH ht	Ancol bậc 2 α-không no, n-ankylancol bậc 1, cacbinol không vòng bậc 2 với vòng 5 hay 6	-	-
1075-1020	IR, R	-C-O-C- ht đx	Nhóm C=C-O-C trong ete vinylic và thơm		
1070	IR, R	-C=C=C- ht đx	Allen và dẫn xuất ankyl của nó		Cường độ mạnh trong phổ IR và Raman
1060-1045	IR	-S=O ht	Ankylsunfoxit	300	-
1056-1-38	IR	ht khung	Xetal và axetal	-	-
1050	IR, R	-C-OH ht	Ancol không no bậc 2, ancol bậc 3 phân nhánh và(hay) không no	m	-
1050-1035	IR		Epoxi	-	-
1050-1030	IR	-P-O-C- ht	Ankyleste của axit oxiphotphoric	rm	-
1046	IR, R	-N=N-	Hợp chất azo thơm		Cường độ yếu trong phổ IR
1030	R	-S=O ht	RSOR	-	-
1028	R, IR	Dao động vòng đx	Oxit trimetylen		Cường độ mạnh trong phổ Raman
1025-1017	IR	Dao động vòng	Ankylxiclopropan	-	-
1000-950	IR	Dao động vòng	Ankylxiclobutan	-	-
996	IR	-C-D bd	Tetrađơterimetan	-	
990	IR	-C-H bd không phẳng ở C=C-H	$RCH=CH_2$	30-50	Cũng ở 910
980-971	IR, R	Dao động vòng kđx	Oxit trimetylen		Cường độ mạnh trong phổ IR

ĐIỂN ĐÀN TOÁN-LÍ-HÓA 100K TRẦN HƯNG ĐẠO TP.QUY NHƠN

WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

https://tieulun.hopto.org

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Bảng 18 (tiếp theo).

Tần số,cm^{-1}	Loại phổ	Loại dao động	Dạng hợp chất	Cường độ	Ghi chú
980-965	IR	-C-H bd không phẳng ở C=C-H	RHC=CHR' *(trans)*	100	-
980-930	IR	ClO_3	Ion clorat	m	-
970	R	Dao động vòng	Xiclobutan	-	-
958	IR, R	Dao động vòng đx	1,3,5-Trioxan		Cường độ mạnh trong phổ Raman
940	IR	C-O-C ht đx	Đimetyl ete (hơi)	-	-
935	IR	-O-H bd không phẳng	Đime của axit cacboxylic	y	-
930	IR, R	C-C ht	Nhóm *tert*-butyl		Cường độ mạnh trong phổ Raman, yếu trong phổ IR
930-910	IR, R	ClO_3	Ion clorat	y	-
918	R	C-O-C ht đx	Đimetyl ete (hơi)	-	-
917	IR	-	Dẫn xuất của axit béo với nhóm epoxi ở mạch nhánh	-	Cũng ở 840
913	IR, R	Dao động vòng đx	Tetrahidrofuran		Cường độ mạnh trong phổ Raman
910	IR	Dao động vòng	Ankylxiclobutan	-	-
910	IR	-C-H bd không phẳng ở C=C-H	$RHC=CH_2$	100-150	Cũng ở 990
893	IR	-	Epoxi *(trans)*	-	-
890	R	Dao động vòng	Xiclopentan	-	-
890	IR	-C-H bd không phẳng ở C=C-H	$R'RC=CH_2$	100-150	-
885-870	IR	C-H bd	Dẫn xuất benzen thế 1,2,4-tri	20	Cũng ở 825-805

Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
https://tieulun.hopto.org
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON
DIỄN ĐÀN TOÁN LÍ HÓA 1000 BÀI HÙNG ĐẠO TP.QUY NHƠN
WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú

Bảng 18 (tiếp theo).

Tần số,cm^{-1}	Loại phổ	Loại dao động	Dạng hợp chất	Cường độ	Ghi chú
880	IR, R	-C-N- ht	Hợp chất nitro béo	-	-
877	IR, R	-O-O- ht	H_2O_2, peoxit hữu cơ		Cường độ mạnh trong phổ Raman, yếu trong phổ IR. Không có ở tất cả các peoxit
870	IR	C-H bd	Dẫn xuất benzen thế 5 lần	-	-
870-855	IR	C-H bd	Dẫn xuất benzen thế 1,2,4,5-tetra	-	-
860-715	IR	-Si-C- ht	Silan	-	-
856-840	IR	Dao động vòng kđx	Oxit etilen		Cường độ mạnh trong phổ IR
850-840	IR	C-H bd	Dẫn xuất benzen thế 1,2,3,5-tetra	-	-
850-830	I	C-H bd	Dẫn xuất benzen thế 1,3,5-tri	-	-
849	IR	-C-N- ht	Hợp chất nitro thơm	-	-
840	IR	-	Dẫn xuất của axit béo với nhóm etoxi ở mạch nhánh	-	Cũng ở 917
840-815	IR	NO_3^-	Ion nitrat	m	-
840-810	IR	-C-H bd không phẳng ở C=C-H	R'RC=CHR"	-	-
840-800	IR	-C-H bd	Liên kết đôi thế 3 lần trong vòng 6	-	2 vạch
838	IR	-S-H bd phẳng	Axit thioaxetic	-	
835-795	IR, R	C-C ht (?)	Nhóm isopropyl và *tert*-butyl		Cường độ mạnh trong phổ Raman, yếu trong phổ IR.
833	IR	-	Epoxi *(cis)*	-	-
833-810	IR	C-H bd	Dẫn xuất benzen thế 1,4-đi	-	-

ÔN THI ĐẠI HỌC MÔN TOÁN-LÍ-HÓA 100% TẠI HƯNG ĐẠO TP.QUY NHƠN
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON
https://tieulun.hopto.org
WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Bảng 18 (tiếp theo).

Tần số cm^{-1}	Loại phổ	Loại dao động	Dạng hợp chất	Cường độ	Ghi chú
832	R	-S-H bd phẳng	Etylmecaptan	-	-
825-805	IR	C-H bd	Dẫn xuất benzen thế 1,2,4-tri	100	-
822	R	Dao động vòng	Xiclohexan (dạng thuyền)	-	-
814	IR	-N-O ht	metyl nitrit *(trans)*, hơi	-	-
813	R	NO_2^-	Ion nitrit	-	-
813	IR, R	Dao động vòng kdx	Tetrahidropiran		Cường độ mạnh trong phổ Raman
810-800	IR, R	C-H bd	Dẫn xuất benzen thế 1,2,3,4-tetra	-	-
810-790	IR	BrO_3^-	Ion bromat	-	-
802	R	Dao động vòng	Xiclohexan (dạng ghế)	-	-
802-790	IR	-O-N=O	RCH_2-O-N=O *(trans)*	-	Hơi
800-770	IR	C-H bd	Dẫn xuất benzen thế 1,3-đi	-	Cũng ở 710-690. Không có trong phổ Raman
800-650	IR	C-H bd	Liên kết đôi thế 2 lần trong vòng 6	50-150	-
785-730	IR	IO_3^-	Ion iodat	-	-
783-775	IR	-O-N=O ht	RR'C-O-N=O	-	Hơi
780-760	IR	C-H bd	Dẫn xuất benzen thế 1,2,3-tri	-	Cũng ở 745-705
780-710	IR	$>CCl_2$, $-CCl_3$	Hợp chất no	-	-
773	IR	C-Cl ht	CCl_4	-	-
764-751	IR	-O-N=O ht	RR'R"C-O-N=O	-	Hơi
760-740	IR	C-H bd	Dẫn xuất benzen thế 1,2-đi	100-500	Không có trong phổ Raman

Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON
https://tieulun.hopto.org
DIỄN ĐÀN TOÁN-LÍ-HÓA 100% TRẮC NGHIỆM ĐẠO TP. QUY NHƠN
WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú

Bảng 18 (tiếp theo).

Tần số, cm^{-1}	Loại phổ	Loại dao động	Dạng hợp chất	Cường độ	Ghi chú
751	IR	-P=S ht	Thiophotphoryl clorua	-	-
750	IR	NO_2	Ion nitrit	-	-
750-650	IR	-P-C- ht	-	-	-
750-600	IR	-C-S-C- ht	Điankylsunfua	-	-
747-737	IR	C-H bd	Dẫn xuất benzen thế mono	100-300	Cũng ở 701-694. Không có trong phổ Raman
745-705	IR	C-H bd	Dẫn xuất benzen thế 1,2,3-tri	-	Cũng ở 780-760. Không có trong phổ Raman
742-716	R	C-H bd	Dẫn xuất benzen thế 1,2,4-tri	-	Không có trong phổ Raman
736-711	R	C-H bd	Dẫn xuất benzen thế 1,2-đi	-	Không có trong phổ Raman
733	R	Dao động vòng	Xiclopentan	-	-
725-675	IR	-C-H bd không phẳng ở C=C-H	RHC=CHR' *(cis)*	-	-
721-711	R	-C-H bd	Dẫn xuất benzen thế 1,3-đi	-	Không có trong phổ IR
720	IR	CH_2 con lắc	$-(CH_2)_n$ (n>4)	3	(trên mỗi nhóm CH_2). Vạch kép trong phổ (trạng thái rắn).
712	IR	C-Cl ht	$CHCl_3$	-	-
710-690	IR	C-H bd	Dẫn xuất benzen thế 1,3-đi	100	Cũng ở 800-770. Không có trong phổ Raman
705-685	IR, R	-C-S- ht	CH_3-S-	-	-

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

https://tieulun.hopto.org

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú

Bảng 18 (tiếp theo).

Tần số,cm^{-1}	Loại phổ	Loại dao động	Dạng hợp chất	Cường độ	Ghi chú
703	R	Dao động vòng	Xiclooctan	-	-
701-694	IR	C-H bd	Dẫn xuất benzen thế mono	100-200	Cũng ở 747-737. Không có trong phổ Raman
700-680	IR	C-H bd	Dẫn xuất benzen thế mono	-	Cũng ở 850-830. Không có trong phổ Raman
700-650	IR	P=S ht (?)	Thiophotphat hữu cơ	-	-
700-600	IR, R	C-S-H ht	mecaptan		Cường độ mạnh trong phổ Raman, yếu trong phổ IR.
700-600	IR	-	Phức kim loại với axetylaxetat	-	-
689-680	IR	O-N=O bd	RCH_2-O-N=O *(cis)*	-	Hơi
682-678	IR	O-N=O bd	RR'C-O-N=O	-	Hơi
680	IR	CBr_2-CBr_3	Hợp chất no	-	-
675	IR	O-D bd không phẳng	R-COOD (dime)	-	-
671	IR	C-H bd	Benzen	500	Không có trong phổ Raman
669	IR	C-Br ht	CBr_4	-	-
660-630	IR, R	-C-S- ht	RCH_2-S-	-	-
656	IR	C-Cl ht	CH_3CH_2Cl	-	-
652-651	R	C-H bd	Dẫn xuất benzen thế 1,2,3-tri	-	Không có trong phổ Raman
650-600	IR, R	-C≡C-H bd	Dẫn xuất axetilen thế mono	m	Hoạ âm ở 1260
650-250	IR	-	Dẫn xuất benzen	-	Đặc trưng cho nhóm thế

ĐIỄN ĐÀN TOÁN-LÍ - HÓA 1000Đ TRẦN HƯNG ĐẠO TP.QUY NHƠN

WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

https://tieulun.hopto.org

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú

Bảng 18 (tiếp theo).

Tần số,cm^{-1}	Loại phổ	Loại dao động	Dạng hợp chất	Cường độ	Ghi chú
630-600	IR, R	-C-S- ht	RR'HC-S-	-	-
628-620	IR	ClO_4	Peclorat hữu cơ và vô cơ	-	-
625-581	IR	-O-N=O bd	RH_2C-O-N=O *(trans)*	-	Hơi
621-613	IR	-O-N=O bd	RR'R"C-O-N=O	-	Hơi
620	R	C-H bd	Dẫn xuất benzen thế mono	-	Không có trong phổ Raman
617	IR	-O-N=O bd	CH_3-O-N=O *(cis)*	-	Hơi
615	IR	C-Cl ht	$(CH_3)_2HC$-Cl	-	-
610	IR, R	$-C-NO_2$ bd	Hợp chất nitro béo	-	-
610-560	R	$-O-NO_2$ bd	Este của axit nitric	m	-
605-594	IR	-O-N=O bd	RR'HC-O-N=O	-	Hơi
600-570	IR, R	-C-S- ht	RR'R"C-S-	-	-
594	I	C-Br ht	CH_3-Br	-	-
580	IR, R	-	RHC=CHR' *(trans)*	-	Trong phổ Raman cũng có ở 413 và 297
570	IR	C-Cl ht	$(CH_3)_3C$-Cl	-	-
570-554	R	C-H bd	Dẫn xuất benzen thế 1,3,5-tri	-	Không có ở phổ IR
565	IR	-O-N=O	CH_3-O-N=O *(trans)*	-	Hơi
550	IR	-	$RCH=CH_2$	-	-
550-450	IR, R	-S-S- ht	Ankyl đisunfua	-	-

ĐỀN ĐOÁN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

https://tieulun.hopto.org

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Bảng 18 (tiếp theo).

Tần số, cm^{-1}	Loại phổ	Loại dao động	Dạng hợp chất	Cường độ	Ghi chú
536	IR	C-Br ht	$(CH_3)_2CH$-Br	-	-
522	IR	C-I ht	CH_3-I	-	-
514	IR	C-Br ht	$(CH_3)_3C$-Br	-	-
500	IR	C-I ht	CH_3CH_2-I	-	-
495	IR	C-I ht	$(CH_3)_2CH$-I	-	-
490	IR	C-I ht	$(CH_3)_3C$-I	-	-
490	IR		RHC=CHR' *trans)*	-	-
490	R	-	RHC=CHR' *trans)*	-	Cũng ở 210
490-430	IR	-S-S- ht	Aryl đisunfua	y	-
435	R	-	RHC=CH_2	-	-
434	R	-	RR'C=CH_2	-	Cũng ở 394, 261
334-234	R	C-C bd	mạch *n*-parafin	-	Tần số giảm khi kéo dài mạch
332	R	-S-H bd không phẳng	mecaptan	-	-
319	IR	C-Cl bd	CCl_4	-	-
183	IR	C-Br bd	CBr_4	-	-

Ghi chú:

ht: hoá trị bd: biến dạng m: mạnh rm: rất mạnh bđ: biến đổi
đx: đối xứng kđx: không đối xứng y: yếu ry: rất yếu tb: trung bình
IR: Phổ hồng ngoại R: Phổ Raman

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP.QUY NHƠN

Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
https://tieulun.hopto.org
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

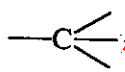
Bảng 19. Bảng tính hằng số cộng tính Xule đối với các dẫn xuất của metan

$\delta = 0{,}23 + \sum \sigma_{\text{hiệudụng}}$, $\sigma_{\text{hiệu dụng}}$: hằng số Xule

Nhóm thế	σ_{effect}	Nhóm thế	σ_{effect}
Cl	2,53	CH_3	0,47
Br	2,33	C=C	1,32
I	1,82	C≡C	1,44
NR_2	1,57	C_6H_5	1,65
OH	2,56	CF_3	1,14
OR	2,56	C≡N	1,70
OC_6H_5	3,23	COR	1,70
O(O=)CR	3,13	COOR	1,50
SR	1,64	$CONR_2$	1,59

Bảng 20. Độ chuyển dịch hóa học proton.

1. Độ chuyển dịch hóa học của các nhóm metyl, metilen và metin thế 1 lần.

R	CH_3-R	$-CH_2$-R	>CH-R
	0,8-1,4	1,25-1	1,5-1,6
a) Nhóm ankyl cách nhóm chức 1 nguyên tử cacbon			
-C-N	0,9-1,1	1,2-1,6	
-C-N-COR	1,2		
-C-CO-R	0,9-1,1	1,6-1,9	
-C-CO-OR (hay NR_2)	1,1-1,2	1,9-2,3	
-C-COCl	1,7		
-C-C=C	1,3	1,2-1,6	
-C-Ar	1,1-1,5	1,6-1,8	

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

(Bảng 20 - tiếp theo).

R	CH_3-R	-CH_2-R	>CH-R
-C-OR	1,1-1,3	1,2-1,8	2,0
-C-O-COR hay -C-O-Ar	1,1-1,3	1,5	
-C-Cl	1,4-1,6	1,6-2,0	1,4-1,6
-C-Br	1,6-1,8	1,7-2,0	1,7-1,8
C-I	1,9-2,0	1,7-1,9	,14-1,6
-C-SO_2R	1,6	2,2	
-C-NO_2	1,6	2,1	
	b) Nhóm ankyl gắn với nhóm chức		
-Si	0	1	
-C=C-	1,5-2,1	1,8-2,3	2,8
-C=C-COR	1,9-2,1	2,4	
-C=C-OR		2,9	
—C=C | COOR (hay CN)	1,9-2,0	2,4	
—C=C | OCOR	1,9		
—C=C | C=C	1,8		
-Ar	2,1-2,5	2,5-3,0	2,7-2,9
-C≡N	2,0		
-C=NOH	1,8		
-COR (andehit, xeton, axit, amit và este của axit)	1,9-2,2	2,0-2,4	2,5-2,7
-COCl (hay Br)	2,7-2,8		
-CO-C=C hay -CO-Ar	1,8-2,7		
-COSR	2,3-2,5		
-S-R	2,1	2,4	
—N<	2,1-2,3	2,3-3,2	2,7-2,9

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

(Bảng 20 - tiếp theo).

R	CH_3-R	$-CH_2$-R	>CH-R
-N-COR -N-SO_2R -N-Ar	2,8-3,1	3,2-3,4	
-N=N-	2,3		
$-N^+$	3,3	3,4	
-OH	3,4	3,6	3,8
-OR	3,2-3,6	3,3-3,6	3,5-4,1
-O-CO-R -O-Ar	3,6-4,0	3,9-4,3	4,8-5,1
$-OB(OR)_2$	3,3		
-Cl	3,1	3,3-3,6	3,9-4,1
-Br	2,6	3,2-3,6	4,0-4,2
-I	2,1	3,0-3,2	4,2
-F	4,3		
-SOR	2,5		
$-SO_2$R	3,1	2,9	
$-SO_2$Cl	3,6		
$-SO_2$F	3,3	3,3	
-O-SOOR	3,6		
$-O-SO_2OR$	3,9		
-S-C≡N	2,6		
-N=C-S		3,6	
$-NO_2$	4,3	4,4	4,7

2. Độ chuyển dịch hóa học của nhóm metin gắn với nhóm chức.

Nhóm thế	δ, ppm	Nhóm thế	δ, ppm
-C=C-	3,5	$(OR)_3$	5,0
Ar	4,2	Br_3	6,8
Ar	6,6	Cl_3	7,1
C=C	4,1		
OR			

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org

Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

3. Độ chuyển dịch hóa học của nhóm metyl thế 2 lần.

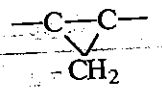
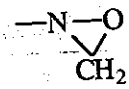
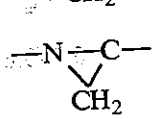
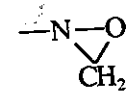
Nhóm thế	-Br	-Cl	-Ar	$-NR_2$	-OH	-OR	-OAr	-OOCR	-SR	-C=C-	-C≡C-	-C≡N	-RC=O	-COOR	$-CONR_2$
-Br	4,1	5,2	4,4	4,1	5,1	4,9	5,8	5,7	4,2	3,9-4,4	3,8	3,7	4,3	4,1	4,2
-Cl	5,3	4,5	4,4	5,3	5,1	6,0	5,9	4,4	4,0	4,1	4,1	4,5	4,2	4,3
-Ar	3,8	3,1	4,6	4,5	5,2	5,3	3,7	3,4-3,9	3,5	3,7	3,8	3,6	4,3
$-NR_2$	3,4	4,3	4,1	5,0	5,8	4,9	3,4	3,2	3,2	3,5	3,5	3,3	3,4
-OH	5,3	5,1	6,0	5,9	4,4	4,1	4,3	4,5	4,4	3,3
-OR	5,0	5,8	5,7	4,2	3,9	4,2	4,2	4,3	4,2
-OAr	6,7	-	6,6	5,1	4,8	4,9	5,2	5,2	5,1	4,9
-OOCR	6,5	5,0	4,7	4,8	5,1	5,1	4,9
-SR	3,5	-	3,1	3,3	3,6	3,6	3,4	3,5
C=C-	2,9	3,0	3,2	3,3	3,1	3,1
-	3,1	3,4	3,4	3,2	3,3
C≡C-	-	3,6	3,6	3,5	3,5
C≡N	3,6	-	3,6	3,5	3,5
RC=O	3,6	3,3	3,4
-COOR	3,3	3,4
$-CONR_2$	3,4

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP.QUY NHƠN

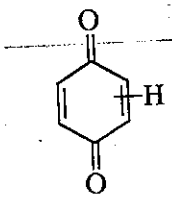
https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

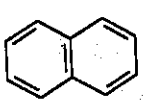
4. Độ chuyển dịch hóa học của vòng 3.

Vòng	δ, ppm	Vòng	δ, ppm
	0,2		2,3
	1,5		2,7

5. Độ chuyển dịch hóa học trong hợp chất axetilen và olefin.

Vòng	δ, ppm	Vòng	δ, ppm
-C≡C-H	2,3-2,9	Br-CH=C-	6,6-7,0
H_2C=C<	4,6	CH=C-C≡C	5,7
-CH=C<	5,1	Ar-C=CH-	5,3-5,4
-C=CH-COR (andehit, xeton, axit và este)	5,7-6,0	ArCH=C-Ar	7,0
-C=CH-OR	6,2	ArCH=C-Br	7,1
-CH=C-OR	4,5-5,5	ArC=CHBr	7,6
R-CO-CH=C-COR	6,0-6,1	ArC=CH-COR (andehit, xeton, axit và este)	6,3-7,0
	6,8-6,9	Ar-CH=C-CO-R (andehit, xeton, axit và este)	7,4-7,7

6. Độ chuyển dịch hóa học trong các dẫn xuất benzen.

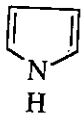
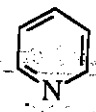
Hợp chất	δ, ppm	Hợp chất	δ, ppm
C_6H_5R, C_6H_5X*	7,1-7,3	$C_6H_5NO_2$	7,7
$C_6H_5NH_2$	6,5	C_6H_5-C=C-	7,1-7,5
$C_6H_4X_2$	7,2-7,4	C_6H_5-C≡C-	7,3
$C_6H_4R_2$ và poliankylbenzen	6,6-7,1	C_6H_5CO-R	7,5
C_6H_5OR	6,8	 vị trí 1 vị trí 2	7,7 7,4
$C_6H_4(OR)_2$	6,7		

* X=halogen

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 9000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

7. Độ chuyển dịch hóa học trong dị vòng.

Hợp chất	δ, ppm	Hợp chất	δ, ppm
 vị trí 2 vị trí 3	6,6 6,1	vị trí 2 vị trí 3	7,4 5,7-6,3
vị trí 2 vị trí 3	7,2 7,0	 vị trí 2 vị trí 3 vị trí 4	8,5 7,2 7,6

8. Độ chuyển dịch hóa học trong andehit.

Hợp chất	δ, ppm
RCHO	9,6-9,8
-C=C-CHO	9,4-9,7
ArCHO	9,6-10,1

9. Độ chuyển dịch hóa học trong các nhóm chức khác.

Hợp chất	δ, ppm
ROCOH	8,0
Ar-CH=N—N-	8,5
RNH_2 và R_2NH	1,7
ROH:	
bậc 1 và bậc 2	5,1
bậc 3	3,5
phenol	7,6

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Bảng 21
Một số đại lượng vật lí quan trọng

1. Các hằng số vật lí

Hằng số	Kí hiệu	Giá trị
Tốc độ ánh sáng	c	$2,99792.10^{8}$ m/s
Hằng số Planck	h	$6,6262.10^{-34}$ J.s
Số Avogadro	N	$6,02204.10^{23}$ mol^{-1}
Hằng số khí	R	8,314 J (K.mol)
Hằng số Boltzmann	k	$1,38066.10^{-23}$ J/K
Khối lượng tĩnh của proton	m_p	$1,67265.10^{-27}$ kg
Khối lượng tĩnh của electron	m_e	$9,10953.10^{-31}$ kg
Khối lượng tĩnh của nơtron	m_n	$1,67495.10^{-27}$ kg
Điện tích của electron	e	$1,60219.10^{-19}$ C
Manhêton Bohr	μ_B	$9,27408.10^{-24}$ $J.T^{-1}$
Manhêton hạt nhân	μ_N	$5,05082.10^{-27}J.T^{-1}$
Hằng số Rydberg	R_∞	$1,09737318.10^{7}m^{-1}$
Momen từ electron	μ_e	$9,28482.10^{-24}$ $J.T^{-1}$
Momen từ proton	μ_p	$1,4106171.10^{-26}$ $J.T^{-1}$

2. Bảng chuyển đổi các hệ số bức xạ điện từ

Đơn vị x	Tần số (Hz)	Số sóng (cm^{-1})	kcal/mol	erg	eV	Chiều dài sóng (cm)
Hz	1,00x	$3,34.10^{-11}$x	$9,54.10^{-14}$x	$6,63.10^{-27}$x	$4,14.10^{-15}$x	$3,00.10^{10}x^{-1}$
cm^{-1}	$3,00.10^{10}$x	1,00x	$2,86.10^{-3}$x	$1,99.10^{-16}$x	$1,24.10^{-4}$x	$1,00x^{-1}$
kcal/mol	$1,05.10^{13}$x	$3,50.10^{2}$x	1,00x	$6,95.10^{-14}$x	$4,34.10^{-2}$x	$2,86.10^{-3}x^{-1}$
erg	$1,51.10^{26}$x	$5,04.10^{15}$x	$1,44.10^{13}$x	1,00x	$6,24.10^{11}$x	$1,99.10^{-16}x^{-1}$
eV	$2,42.10^{14}$x	$8,07.10^{3}$x	2,31.10x	$1,60.10^{-12}$x	1,00x	$1,24.10^{-4}x^{-1}$
cm	$3,00.10^{10}x^{-1}$	$1,00x^{-1}$	$2,86.10^{-3}x^{-1}$	$1,99.10^{-16}x^{-1}$	$1,24.10^{-4}x^{-1}$	1,00x
nm	$3,00.10^{17}x^{-1}$	$1,00.10^{7}x^{-1}$	$2,86.10^{4}x^{-1}$	$1,99.10^{-9}x^{-1}$	$1,24.10^{3}x^{-1}$	$1,00.10^{-7}$x

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP QUY NHƠN

Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

3. Bảng chuyển đổi các hệ số năng lượng

	erg	jun	calo	lit.atmotphe	electron-von
1 erg=	1	10^{-7}	$2,3901.10^{-8}$	$9,8687.10^{-10}$	$6,2418.10^{11}$
1 jun=	10^{7}	1	$2,3901.10^{-1}$	$9,8687.10^{-3}$	$6,2418.10^{18}$
1 calo=	$4,1840.10^{7}$	4,1840	1	$4,1291.10^{-2}$	$2,6116.10^{19}$
1 lit.atmotphe=	$1,0133.10^{9}$	$1,0133.10^{2}$	24,218	1	$6,3248.10^{20}$
1 electron-von=	$1,6021.10^{-12}$	$1,6021.10^{-19}$	$3,8291.10^{-20}$	$1,5811.10^{-21}$	1

4. Quan hệ giữa các đơn vị của một số đại lượng vật lí

Đại lượng	Tên gọi	Kí hiệu	CGSE	CGSM
Chiều dài	met	m	10^{2} cm	10^{2} cm
Khối lượng	kilogam	kg	10^{3} g	10^{3} g
Thời gian	giây	s	1s	1s
Cường độ dòng điện	ampe	A	3.10^{9}	10^{-1}
Nhiệt độ nhiệt động	kenvin	K		
Số lượng vật chất	mol	mol		
Cường độ ánh sáng	candela	cd		
Tốc độ	met/giây	m/s	10^{2} cm/s	10^{2} cm/s
Năng lượng và công	jun	J	10^{7} erg	10^{7} erg
Lực	niutơn	N	10^{5} din	10^{5} din
Công suất	oát	W	10^{7} erg/s	10^{7} erg/s
Điện tích	culông	C	3.10^{9}	10^{-1}
Điện áp	vôn	V	1/300	10^{3}
Cường độ điện trường	vôn/met	V/m	$1/3.10^{-4}$	10^{6}
Điện dung	fara	F	9.10^{11} cm	10^{-9}
Điện trở	ôm	Ω	$1/9.10^{-11}$	10^{-9}
Độ cảm ứng từ	tesla	T	$1/3.10^{-6}$	10^{4} gaus (Gs)
Từ thông	vêbe	Wb	1/300	10^{8} macxoen(Mxw)
Cường độ từ trường	ampe/met	A/m	$12\pi.10^{7}$	$4\pi.10^{-3}$oelet (Oe)
Độ cảm ứng	henri	H	$1/9.10^{-11}$	10^{9}
Quang thông	lumen	lm		
Độ chói	candela/m^2	cd/m^2		

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Bảng 22
Bảng chuyển đổi chiều dài bước sóng và số sóng

Bước sóng µm	Số sóng cm^{-1}									
	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
2,0	5000	4975	4950	4926	4902	4878	4854	4831	4808	4785
2,1	4762	4739	4717	4695	4673	4651	4630	4608	4587	4566
2,2	4545	4525	4505	4484	4464	4444	4425	4405	4386	4367
2,3	4348	4329	4310	4292	4274	4255	4237	4219	4202	4184
2,4	4167	4149	4132	4115	4098	4082	4065	4049	4032	4016
2,5	4000	3984	3968	3953	3937	3922	3906	3891	3876	3861
2,6	3846	3831	3817	3802	3788	3774	3759	3745	3731	3717
2,7	3704	3690	3676	3663	3650	3636	3623	3610	3597	3584
2,8	3571	3559	3546	3534	3521	3509	3497	3484	3472	3460
2,9	3448	3436	3425	3413	3401	3390	3378	3367	3356	3344
3,0	3333	3322	3311	3300	3289	3279	3268	3257	3247	3236
3,1	3226	3215	3205	3195	3185	3175	3165	3155	3145	3135
3,2	3125	3115	3106	3096	3086	3077	3067	3058	3049	3040
3,3	3030	3021	3012	3003	2994	2985	2976	2967	2959	2950
3,4	2941	2933	2924	2915	2907	2899	2890	2882	2874	2865
3,5	2857	2849	2841	2833	2825	2817	2809	2801	2793	2786
3,6	2778	2770	2762	2755	2747	2740	2732	2725	2717	2710
3,7	2703	2695	2688	2681	2674	2667	2660	2653	2646	2639
3,8	2632	2625	2618	2611	2604	2597	2591	2584	2577	2571
3,9	2564	2558	2551	2545	2538	2532	2525	2519	2513	2506
4,0	2500	2494	2488	2481	2475	2469	2463	2457	2451	2445
4,1	2439	2433	2427	2421	2415	2410	2404	2398	2392	2387
4,2	2381	2375	2370	2364	2358	2353	2347	2342	2336	2331
4,3	2326	2320	2315	2309	2304	2299	2294	2288	2283	2278
4,4	2273	2268	2262	2257	2252	2247	2242	2237	2232	2227
4,5	2222	2217	2212	2208	2203	2198	2193	2188	2183	2179
4,6	2174	2169	2165	2160	2155	2151	2146	2141	2137	2132
4,7	2128	2123	2119	2114	2110	2105	2101	2096	2092	2088
4,8	2083	2079	2075	2070	2066	2062	2058	2053	2049	2045
4,9	2041	2037	2033	2028	2024	2020	2016	2012	2008	2004
5,0	2000	1996	1992	1988	1984	1980	1976	1972	1969	1965
5,1	1961	1957	1953	1949	1946	1942	1938	1934	1931	1927
5,2	1923	1919	1916	1912	1908	1905	1901	1898	1894	189[illegible]
5,3	1887	1883	1880	1876	1873	1869	1866	1862	1859	185[illegible]
5,4	1852	1848	1845	1842	1338	1835	1832	1828	1825	182[illegible]
5,5	1818	1815	1812	1808	1805	1802	1799	1795	1792	178[illegible]
5,6	1786	1783	1779	1776	1773	1770	1767	1764	1761	175[illegible]
5,7	1754	1751	1748	1745	1742	1739	1736	1733	1730	172[illegible]
5,8	1724	1721	1718	1715	1712	1709	1706	1704	1701	169[illegible]
5,9	1695	1692	1689	1686	1684	1681	1678	1675	1672	166[illegible]
6,0	1667	1664	1661	1658	1656	1653	1650	1647	1645	164[illegible]
6,1	1639	1637	1634	1631	1629	1626	1623	1621	1618	161[illegible]
6,2	1613	1610	1608	1605	1603	1600	1597	1595	1592	159[illegible]
6,3	1587	1585	1582	1580	1577	1575	1572	1570	1567	156[illegible]
6,4	1563	1560	1558	1555	1553	1550	1548	1546	1543	154[illegible]
6,5	1538	1536	1534	1531	1529	1527	1524	1522	1520	15[illegible]

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP.QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Bảng 22 (tiếp theo)

Bước sóng µm	Số sóng cm^{-1}									
	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
6,6	1515	1513	1511	1508	1506	1504	1502	1499	1497	1495
6,7	1493	1490	1488	1486	1484	1481	1479	1477	1475	1473
6,8	1471	1468	1466	1464	1462	1460	1458	1456	1453	1451
6,9	1449	1447	1445	1443	1441	1439	1437	1435	1433	1431
7,0	1429	1427	1425	1422	1420	1418	1416	1414	1412	1410
7,1	1408	1406	1404	1403	1401	1399	1397	1395	1393	1391
7,2	1389	1387	1385	1383	1381	1379	1377	1376	1374	1372
7,3	1370	1368	1366	1364	1362	1361	1359	1357	1355	1353
7,4	1351	1350	1348	1346	1344	1342	1340	1339	1337	1335
7,5	1333	1332	1330	1328	1326	1325	1323	1321	1319	1318
7,6	1316	1314	1312	1311	1309	1307	1305	1304	1302	1300
7,7	1299	1297	1295	1294	1929	1290	1289	1287	1285	1284
7,8	1282	1280	1279	1277	1276	1274	1272	1271	1269	1267
7,9	1266	1264	1263	1261	1259	1258	1256	1255	1253	1252
8,0	1250	1248	1247	1245	1244	1242	1241	1239	1238	1236
8,1	1235	1233	1232	1230	1229	1227	1225	1224	1222	1221
8,2	1220	1218	1217	1215	1214	1212	1211	1209	1208	1206
8,3	1205	1203	1202	1200	1199	1198	1196	1195	1193	1192
8,4	1190	1189	1188	1186	1185	1183	1182	1181	1179	1178
8,5	1176	1175	1174	1172	1171	1170	1168	1167	1166	1164
8,6	1163	1161	1160	1159	1157	1156	1155	1153	1152	1151
8,7	1149	1148	1147	1145	1144	1143	1142	1140	1139	1138
8,8	1136	1135	1134	1133	1131	1130	1129	1127	1126	1125
8,9	1124	1122	1121	1120	1119	1117	1116	1115	1114	1112
9,0	1111	1110	1109	1107	1106	1105	1104	1103	1101	1100
9,1	1099	1098	1096	1095	1094	1093	1092	1091	1089	1088
9,2	1087	1086	1085	1083	1082	1081	1080	1079	1078	1076
9,3	1075	1074	1073	1072	1071	1070	1068	1067	1066	1065
9,4	1064	1063	1062	1060	1059	1058	1057	1056	1055	1054
9,5	1053	1052	1050	1049	1048	1047	1046	1045	1044	1043
9,6	1042	1041	1040	1038	1037	1036	1035	1034	1033	1032
9,7	1031	1030	1029	1028	1027	1026	1025	1024	1022	1021
9,8	1020	1019	1018	1017	1016	1015	1014	1013	1012	1011
9,9	1010	1009	1008	1007	1006	1005	1004	1003	1002	1001
10,0	1000	999	998	997	996	995	994	993	992	991
10,1	990	989	988	987	986	985	984	983	982	981
10.2	980	979	978	978	977	976	975	974	973	972
10,3	971	970	969	968	967	966	965	964	963	962
10,4	962	961	960	959	958	957	956	955	954	953
10,5	952	951	951	950	949	948	947	946	945	944
10,6	943	943	942	941	940	939	938	937	936	935
10,7	935	934	933	932	931	930	929	929	928	927
10,8	926	925	924	923	923	922	921	920	919	918
10,9	917	917	916	915	914	913	912	912	911	910
11,0	909	908	907	907	906	905	904	903	903	902
11,1	901	900	899	898	898	897	896	895	894	894
11,2	893	892	891	890	890	889	888	887	887	886
11,3	885	884	883	883	882	881	880	880	879	878
11,4	877	876	876	875	874	873	873	872	871	870
11,5	870	869	868	867	867	866	865	864	864	863

DIỄN ĐÀN CÁN BỘ - HỘI 1009 TRẦN HƯNG ĐẠO TP QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Bảng 21
Một số đại lượng vật lí quan trọng

1. Các hằng số vật lí

Hằng số	Kí hiệu	Giá trị
Tốc độ ánh sáng	c	$2,99792.10^{8}$ m/s
Hằng số Planck	h	$6,6262.10^{-34}$ J.s
Số Avogadro	N	$6,02204.10^{23}$ mol^{-1}
Hằng số khí	R	8,314 J (K.mol)
Hằng số Boltzmann	k	$1,38066.10^{-23}$ J/K
Khối lượng tĩnh của proton	m_p	$1,67265.10^{-27}$ kg
Khối lượng tĩnh của electron	m_e	$9,10953.10^{-31}$ kg
Khối lượng tĩnh của nơtron	m_n	$1,67495.10^{-27}$ kg
Điện tích của electron	e	$1,60219.10^{-19}$ C
Manhêton Bohr	μ_B	$9,27408.10^{-24}$ $J.T^{-1}$
Manhêton hạt nhân	μ_N	$5,05082.10^{-27}$ $J.T^{-1}$
Hằng số Rydberg	R_∞	$1,09737318.10^{7}$ m^{-1}
Momen từ electron	μ_e	$9,28482.10^{-24}$ $J.T^{-1}$
Momen từ proton	μ_p	$1,4106171.10^{-26}$ $J.T^{-1}$

2. Bảng chuyển đổi các hệ số bức xạ điện từ

Đơn vị x	Tần số (Hz)	Số sóng (cm^{-1})	kcal/mol	erg	eV	Chiều dài sóng (cm)
Hz	1,00x	$3,34.10^{-11}$x	$9,54.10^{-14}$x	$6,63.10^{-27}$x	$4,14.10^{-15}$x	$3,00.10^{10}x^{-1}$
cm^{-1}	$3,00.10^{10}$x	1,00x	$2,86.10^{-3}$x	$1,99.10^{-16}$x	$1,24.10^{-4}$x	$1,00x^{-1}$
kcal/mol	$1,05.10^{13}$x	$3,50.10^{2}$x	1,00x	$6,95.10^{-14}$x	$4,34.10^{-2}$x	$2,86.10^{-3}x^{-1}$
erg	$1,51.10^{26}$x	$5,04.10^{15}$x	$1,44.10^{13}$x	1,00x	$6,24.10^{11}$x	$1,99.10^{-16}x^{-1}$
eV	$2,42.10^{14}$x	$8,07.10^{3}$x	2,31.10x	$1,60.10^{-12}$x	1,00x	$1,24.10^{-4}x^{-1}$
cm	$3,00.10^{10}x^{-1}$	$1,00x^{-1}$	$2,86.10^{-3}x^{-1}$	$1,99.10^{-16}x^{-1}$	$1,24.10^{-4}x^{-1}$	1,00x
nm	$3,00.10^{17}x^{-1}$	$1,00.10^{7}x^{-1}$	$2,86.10^{4}x^{-1}$	$1,99.10^{-9}x^{-1}$	$1,24.10^{3}x^{-1}$	$1,00.10^{-7}$x

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

3. Bảng chuyển đổi các hệ số năng lượng

	erg	jun	calo	lit.atmotphe	electron-von
1 erg=	1	10^{-7}	$2,3901.10^{-8}$	$9,8687.10^{-10}$	$6,2418.10^{11}$
1 jun=	10^{7}	1	$2,3901.10^{-1}$	$9,8687.10^{-3}$	$6,2418.10^{18}$
1 calo=	$4,1840.10^{7}$	4,1840	1	$4,1291.10^{-2}$	$2,6116.10^{19}$
1 lit.atmotphe=	$1,0133.10^{9}$	$1,0133.10^{2}$	24,218	1	$6,3248.10^{20}$
1 electron-von=	$1,6021.10^{-12}$	$1,6021.10^{-19}$	$3,8291.10^{-20}$	$1,5811.10^{-21}$	1

4. Quan hệ giữa các đơn vị của một số đại lượng vật lí

Đại lượng	Tên gọi	Kí hiệu	CGSE	CGSM
Chiều dài	met	m	10^{2} cm	10^{2} cm
Khối lượng	kilogam	kg	10^{3} g	10^{3} g
Thời gian	giây	s	1s	1s
Cường độ dòng điện	ampe	A	3.10^{9}	10^{-1}
Nhiệt độ nhiệt động	kenvin	K		
Số lượng vật chất	mol	mol		
Cường độ ánh sáng	candela	cd		
Tốc độ	met/giây	m/s	10^{2} cm/s	10^{2} cm/s
Năng lượng và công	jun	J	10^{7} erg	10^{7} erg
Lực	niutơn	N	10^{5} din	10^{5} din
Công suất	oat	W	10^{7} erg/s	10^{7} erg/s
Điện tích	culông	C	3.10^{9}	10^{-1}
Điện áp	vôn	V	1/300	10^{3}
Cường độ điện trường	vôn/met	V/m	$1/3.10^{-4}$	10^{6}
Điện dung	fara	F	9.10^{11} cm	10^{-9}
Điện trở	ôm	Ω	$1/9.10^{-11}$	10^{-9}
Độ cảm ứng từ	tesla	T	$1/3.10^{-6}$	10^{4} gaus (Gs)
Từ thông	vêbe	Wb	1/300	10^{8} macxoen(Mxw)
Cường độ từ trường	ampe/met	A/m	$12\pi.10^{7}$	$4\pi.10^{-3}$oelet (Oe)
Độ cảm ứng	henri	H	$1/9.10^{-11}$	10^{9}
Quang thông	lumen	lm		
Độ chói	candela/m^2	cd/m^2		

ĐỀU ĐẠN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Bảng 22
Bảng chuyển đổi chiều dài bước sóng và số sóng

Bước sóng µm	Số sóng cm^{-1}									
	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
2,0	5000	4975	4950	4926	4902	4878	4854	4831	4808	4785
2,1	4762	4739	4717	4695	4673	4651	4630	4608	4587	4566
2,2	4545	4525	4505	4484	4464	4444	4425	4405	4386	4367
2,3	4348	4329	4310	4292	4274	4255	4237	4219	4202	4184
2,4	4167	4149	4132	4115	4098	4082	4065	4049	4032	4016
2,5	4000	3984	3968	3953	3937	3922	3906	3891	3876	3861
2,6	3846	3831	3817	3802	3788	3774	3759	3745	3731	3717
2,7	3704	3690	3676	3663	3650	3636	3623	3610	3597	3584
2,8	3571	3559	3546	3534	3521	3509	3497	3484	3472	3460
2,9	3448	3436	3425	3413	3401	3390	3378	3367	3356	3344
3,0	3333	3322	3311	3300	3289	3279	3268	3257	3247	3236
3,1	3226	3215	3205	3195	3185	3175	3165	3155	3145	3135
3,2	3125	3115	3106	3096	3086	3077	3067	3058	3049	3040
3,3	3030	3021	3012	3003	2994	2985	2976	2967	2959	2950
3,4	2941	2933	2924	2915	2907	2899	2890	2882	2874	2865
3,5	2857	2849	2841	2833	2825	2817	2809	2801	2793	2786
3,6	2778	2770	2762	2755	2747	2740	2732	2725	2717	2710
3,7	2703	2695	2688	2681	2674	2667	2660	2653	2646	2639
3,8	2632	2625	2618	2611	2604	2597	2591	2584	2577	2571
3,9	2564	2558	2551	2545	2538	2532	2525	2519	2513	2506
4,0	2500	2494	2488	2481	2475	2469	2463	2457	2451	2445
4,1	2439	2433	2427	2421	2415	2410	2404	2398	2392	2387
4,2	2381	2375	2370	2364	2358	2353	2347	2342	2336	2331
4,3	2326	2320	2315	2309	2304	2299	2294	2288	2283	2278
4,4	2273	2268	2262	2257	2252	2247	2242	2237	2232	2227
4,5	2222	2217	2212	2208	2203	2198	2193	2188	2183	2179
4,6	2174	2169	2165	2160	2155	2151	2146	2141	2137	2132
4,7	2128	2123	2119	2114	2110	2105	2101	2096	2092	2088
4,8	2083	2079	2075	2070	2066	2062	2058	2053	2049	2045
4,9	2041	2037	2033	2028	2024	2020	2016	2012	2008	2004
5,0	2000	1996	1992	1988	1984	1980	1976	1972	1969	1965
5,1	1961	1957	1953	1949	1946	1942	1938	1934	1931	1927
5,2	1923	1919	1916	1912	1908	1905	1901	1898	1894	1890
5,3	1887	1883	1880	1876	1873	1869	1866	1862	1859	1855
5,4	1852	1848	1845	1842	1338	1835	1832	1828	1825	1821
5,5	1818	1815	1812	1808	1805	1802	1799	1795	1792	1788
5,6	1786	1783	1779	1776	1773	1770	1767	1764	1761	1757
5,7	1754	1751	1748	1745	1742	1739	1736	1733	1730	1727
5,8	1724	1721	1718	1715	1712	1709	1706	1704	1701	1698
5,9	1695	1692	1689	1686	1684	1681	1678	1675	1672	1669
6,0	1667	1664	1661	1658	1656	1653	1650	1647	1645	1642
6,1	1639	1637	1634	1631	1629	1626	1623	1621	1618	1616
6,2	1613	1610	1608	1605	1603	1600	1597	1595	1592	1590
6,3	1587	1585	1582	1580	1577	1575	1572	1570	1567	1565
6,4	1563	1560	1558	1555	1553	1550	1548	1546	1543	1541
6,5	1538	1536	1534	1531	1529	1527	1524	1522	1520	1517

DIỄN ĐÀN TOÁN-LÝ - HÓA 10&12 TRƯỜNG THPT CHUYÊN LÊ QUÝ ĐÔN QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Bảng 22 (tiếp theo)

Bước sóng µm	Số sóng cm^{-1}									
	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
6,6	1515	1513	1511	1508	1506	1504	1502	1499	1497	1495
6,7	1493	1490	1488	1486	1484	1481	1479	1477	1475	1473
6,8	1471	1468	1466	1464	1462	1460	1458	1456	1453	1451
6,9	1449	1447	1445	1443	1441	1439	1437	1435	1433	1431
7,0	1429	1427	1425	1422	1420	1418	1416	1414	1412	1410
7,1	1408	1406	1404	1403	1401	1399	1397	1395	1393	1391
7,2	1389	1387	1385	1383	1381	1379	1377	1376	1374	1372
7,3	1370	1368	1366	1364	1362	1361	1359	1357	1355	1353
7,4	1351	1350	1348	1346	1344	1342	1340	1339	1337	1335
7,5	1333	1332	1330	1328	1326	1325	1323	1321	1319	1318
7,6	1316	1314	1312	1311	1309	1307	1305	1304	1302	1300
7,7	1299	1297	1295	1294	1929	1290	1289	1287	1285	1284
7,8	1282	1280	1279	1277	1276	1274	1272	1271	1269	1267
7,9	1266	1264	1263	1261	1259	1258	1256	1255	1253	1252
8,0	1250	1248	1247	1245	1244	1242	1241	1239	1238	1236
8,1	1235	1233	1232	1230	1229	1227	1225	1224	1222	1221
8,2	1220	1218	1217	1215	1214	1212	1211	1209	1208	1206
8,3	1205	1203	1202	1200	1199	1198	1196	1195	1193	1192
8,4	1190	1189	1188	1186	1185	1183	1182	1181	1179	1178
8,5	1176	1175	1174	1172	1171	1170	1168	1167	1166	1164
8,6	1163	1161	1160	1159	1157	1156	1155	1153	1152	1151
8,7	1149	1148	1147	1145	1144	1143	1142	1140	1139	1138
8,8	1136	1135	1134	1133	1131	1130	1129	1127	1126	1125
8,9	1124	1122	1121	1120	1119	1117	1116	1115	1114	1112
9,0	1111	1110	1109	1107	1106	1105	1104	1103	1101	1100
9,1	1099	1098	1096	1095	1094	1093	1092	1091	1089	1088
9,2	1087	1086	1085	1083	1082	1081	1080	1079	1078	1076
9,3	1075	1074	1073	1072	1071	1070	1068	1067	1066	1065
9,4	1064	1063	1062	1060	1059	1058	1057	1056	1055	1054
9,5	1053	1052	1050	1049	1048	1047	1046	1045	1044	1043
9,6	1042	1041	1040	1038	1037	1036	1035	1034	1033	1032
9,7	1031	1030	1029	1028	1027	1026	1025	1024	1022	1021
9,8	1020	1019	1018	1017	1016	1015	1014	1013	1012	1011
9,9	1010	1009	1008	1007	1006	1005	1004	1003	1002	1001
10,0	1000	999	998	997	996	995	994	993	992	991
10,1	990	989	988	987	986	985	984	983	982	981
10.2	980	979	978	978	977	976	975	974	973	972
10,3	971	970	969	968	967	966	965	964	963	962
10,4	962	961	960	959	958	957	956	955	954	953
10,5	952	951	951	950	949	948	947	946	945	944
10,6	943	943	942	941	940	939	938	937	936	935
10,7	935	934	933	932	931	930	929	929	928	927
10,8	926	925	924	923	923	922	921	920	919	918
10,9	917	917	916	915	914	913	912	912	911	910
11,0	909	908	907	907	906	905	904	903	903	902
11,1	901	900	899	898	898	897	896	895	894	894
11,2	893	892	891	890	890	889	888	887	887	886
11,3	885	884	883	883	882	881	880	880	879	878
11,4	877	876	876	875	874	873	873	872	871	870
11,5	870	869	868	867	867	866	865	864	864	863

ĐỀN ĐÁP TOÁN - LÍ - HÓA 1000 BÀI LUYỆN THI ĐẠI HỌC TRÔN BỘ

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Bảng 22 (tiếp theo)

Bước sóng	Số sóng.cm^{-1}									
μm	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
11,6	862	861	861	860	859	857	858	857	856	855
11,7	855	854	853	853	852	851	850	850	849	848
11,8	847	847	846	845	845	844	843	842	842	841
11,9	840	840	839	838	838	837	836	835	835	834
12,0	833	833	832	831	831	830	829	829	828	827
12,1	826	820	825	824	824	823	822	822	821	820
12,2	820	819	818	818	817	816	816	815	814	814
12,3	813	812	812	811	810	810	809	808	808	807
12,4	806	806	805	805	804	803	803	802	801	801
12,5	800	799	799	798	797	797	796	796	795	794
12,6	794	793	792	792	791	791	790	789	789	788
12,7	787	787	786	786	785	784	784	783	782	782
12,8	781	781	780	779	779	778	778	777	776	776
12,9	775	775	774	773	773	772	772	771	770	770
13,0	769	769	768	767	767	766	766	765	765	764
13,1	763	763	762	762	761	760	760	759	759	758
13,2	758	757	756	756	755	755	754	754	753	752
13,3	752	751	751	750	750	749	749	748	747	747
13,4	746	746	745	745	744	743	743	742	742	741
13,5	741	740	740	739	739	738	737	737	736	736
13,6	735	735	734	734	733	733	732	732	731	730
13,7	730	729	729	728	728	727	726	726	726	725
13,8	725	724	724	723	723	722	721	721	720	720
13,9	719	719	718	718	717	717	716	716	715	715
14,0	714	714	713	713	712	712	711	711	710	710
14,1	709	709	708	708	707	707	706	706	705	705
14,2	704	704	703	703	702	702	701	701	700	700
14,3	699	699	698	698	697	697	696	696	795	695
14,4	694	694	693	693	693	692	692	691	691	690
14,5	690	689	689	688	688	687	687	686	686	685
14,6	685	684	684	684	683	683	682	682	681	681
14,7	680	680	679	679	678	678	678	677	677	676
14,8	676	675	675	674	674	673	673	672	972	672
14,9	671	671	670	670	669	669	668	668	668	667

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 10 03 TRẦN HƯNG ĐẠO TP.QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Bảng 23

Giá trị hàm Loren

$$\frac{n^2-1}{n^2+2}\cdot 10^4$$

n	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
1,30	1870	1876	1881	1887	1893	1898	1904	1910	1916	1921
1,31	1927	1933	1938	1944	1950	1955	1961	1967	1972	1978
1,32	1984	1989	1995	2001	2006	2012	2018	2023	2029	2034
1,33	2040	2046	2051	2057	2063	2068	2074	2079	2085	2090
1,34	2096	2102	2107	2113	2148	2124	2130	2135	2141	2146
1,35	2152	2157	2163	2168	2174	2179	2185	2190	2196	2202
1,36	2207	2212	2218	2224	2229	2234	2240	2245	2251	2256
1,37	2262	2267	2273	2278	2284	2289	2295	2300	2306	2311
1,38	2316	2322	2327	2333	2338	2344	2349	2354	2360	2365
1,39	2370	2376	2381	2387	2392	2397	2403	2408	2414	2419
1,40	2424	2430	2435	2440	2446	2451	2456	2462	2467	2472
1,41	2478	2483	2488	2494	2499	2504	2510	2515	2520	2525
1,42	2531	2536	2541	2546	2552	2557	2562	2568	2573	2578
1,43	2583	2588	2594	2599	2604	2609	2615	2620	2625	2603
1,44	2636	2641	2646	2651	2656	2662	2667	2672	2677	2682
1,45	2687	2693	2698	2703	2708	2713	2718	2724	2729	2734
1,46	2739	2744	2749	2754	2759	2764	2770	2775	2780	2785
1,47	2790	2795	2800	2805	2810	2815	2820	2826	2831	2836
1,48	2841	2846	2851	2856	2861	2866	2871	2876	2881	2886
1,49	2891	2896	2901	2906	2911	2916	2921	2926	2931	2936
1,50	2941	2946	2951	2956	2961	2966	2971	2976	2981	2986
1,51	2991	2996	3001	3006	3011	3016	3020	3025	3030	3035
1,52	3040	3045	3050	3055	3060	3065	3070	3074	3079	3084
1,53	3089	3094	3099	3104	3108	3113	3118	3123	3128	3133
1,54	3138	3142	3147	3152	3157	3162	3166	3171	3176	3181
1,55	3186	3190	3195	3200	3205	3210	3214	3219	3224	3229
1,56	3234	3238	3243	3248	3252	3257	3262	3267	3272	3276
1,57	3281	3286	3290	3295	3300	3304	3309	3314	3319	3323
1,58	3328	3333	3337	3342	3347	3351	3356	3361	3365	3370
1,59	3375	3379	3384	3389	3393	3568	3403	3407	3412	3416
1,60	3421	3426	3430	3435	3440	3444	3449	3453	3458	3462
1,61	3467	3472	3476	3481	3485	3490	3494	3499	3504	3508
1,62	3513	3517	3522	3526	3531	3535	3540	3544	3549	3553
1,63	3558	3562	3567	3572	3576	3580	3584	3589	3594	3598
1,64	3603	3607	3612	3616	3621	3625	3630	3634	3638	3643
1,65	3647	3652	3656	3661	3665	3670	3674	3678	3683	3687
1,66	3692	3696	3700	3705	3709	3714	3718	3722	3727	3731
1,67	3736	3740	3744	3749	3753	3757	3762	3766	3770	3775
1,68	3779	3783	3783	3792	3796	3801	3805	3809	3814	3818
1,69	3822	3826	3831	3835	3839	3844	3848	3852	3856	3861

6

1	0,6
2	1,2
3	1,8
4	2,4
5	3,0
6	3,6
7	4,2
8	4,8
9	5,4

5

1	0,5
2	1,0
3	1,5
4	2,0
5	2,5
6	3,0
7	3,5
8	4,0
9	4,5

4

1	0,4
2	0,8
3	1,2
4	1,6
5	2,0
6	2,4
7	2,8
8	3,2
9	3,6

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÝ - HÓA 10000 TRẠNG HỌC ĐẠO TRẦN QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

MỘT SỐ TỪ ANH-VIỆT-PHÁP THÔNG DỤNG CHUYÊN NGÀNH.

VIỆT-ANH-PHÁP

biến đổi Fourier	Fourier transform	transform de Fourier
bề rộng khe phổ	spectral slit width	largeur spectrale de la fente
bề rộng nửa vân sóng	half band width	demi-largeur de la bande
bộ phận phân tách khối lượng	mass analyser	analyseur de mass
bộ phận thu tín hiệu	receiver	récepteur
cách tử	grating	réseau
cản trở lập thể	steric hindrance	empêchement stérique
cường độ	intensity	intensité
cường độ dao động	oscillator strength	force oscillature
cộng hưởng từ kép	double resonance	double résonance
cấu trúc tinh tế	fine structure	structure fine
chiều dài bước sóng	wave length	longueur d'onde
chuyển vị	rearrangement	réarrangements
cuvet hấp thụ	absorption cell	cuve d' absirption
dao động đối xứng	symmetric vibration	vibration symétrique
dao động điều hoà	overtones (vibration)	harmoniques
dao động đu đưa	rocking vibration	vibration de balacement
dao động bất đối xứng	asymmetric vibration	vibration asymétrique
dao động biến dạng	bending vibration	vibration de déformation
dao động chuẩn	normal vibration	vibration fondamentale
dao động hình kéo	scissoring vibration	vibration de ciseau
dao động hoá trị	stretching vibration	vibration de valence
dao động khung (bộ xương)	skeletal vibration	vibration de squelette
dao động tổ hợp	combination vibration	vibration de combinaison
dao động ve vẩy	wagging vibration	vibration de rotation plane
dao động xoắn	twisting vibration	vibration de torsion
độ chuyển dịch hóa học	chemical shift	déplacements chimiques
độ truyền qua	transmittance	transmission
độ tự do	degree of freedom	degré de liberté
đường chuẩn	calibration curve	couee d'étalonnage
đường cong thế	potantial curve	courbe de potential
đường cong tích phân	integral curve	courbe d'intégrale
điện từ trường	electromagnetic field	champ électromagnetique
điện trường	electric field	champ électrique

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP.QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org

Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

ống nhân quang	photo-multiplier	multiplicateur
ghép	coupling	couplage
hằng số lực	force constant	constant de force
hằng số tương tác spin-spin	spin-spin coupling constant	constante de couplage spin-spin
hiệu ứng môi trường	environmental effect	effet des evironments
hiệu suất lượng tử	quantum yield	éfficacité de quantum
hệ số tắt	extinction-coefficient	coefficient d'extinction
hệ thống nạp mẫu	sample inlet system	système d'injection d'échantillon
hồng ngoại	infrared	infrarouge
hồng ngoại gần	near infrared	infrarouge proche
ion đồng vị	isotop ion	ion isotopique
ion hoá	ionization	ionisation
ion hoá hóa học	chemical ionization	ionisation chimique
ion hoá trường	field ionization	ionisation de champ
ion kém bền	metastabil ion	ion metastable
ion phân tử	molecular ion	ion moléculaire
khả kiến	visible	visible
khả năng chuyển dời	transition probability	probabilité de transition
khả năng phân cực	polarizability	polarisabilité
khả năng phân giải	resolving power	pouvoir de résolution
khe	slit	fente
khối phổ kế hội tụ kép	double focusing mass spectrometer	spectromètre de mass à double focalisation
khối phổ kế hội tụ đơn	single focusing mass spectrometer	spectromètre de mass à simple focalisation
khối phổ kế tứ cực	quadrupole mass spectrometer	spectromètre de mass quadripolaire
lăng kính	prism	prisme
máy (bộ) đơn sắc	monochromator	monochromateur
màng kali bromua	potassium bromide disk	pastille de bromure de potassium
màu bổ sung (bổ sắc)	complementary colour	couleur complémentaire
mặt phẳng đối xứng	symmetric plane	plan de symétrie
mật độ quang	optical density	densité
mẫu	sample	échantillon
mức năng lượng	energy levels	niveau d'energie
momen chuyển	transition moment	moment de transition
momen lưỡng cực	dipole moment	moment dipolair
momen quán tính	moment of inertia	moment d'inertie

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 10CB TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

	(inertia moment)	
nam châm	magnet	aimant
nam châm điện	electromagnet	aiment electrique
nam châm siêu dẫn	superconducting magnet	aiment supraconducteur
nam châm vĩnh cửu	permanent magnet	aimant permanent
nghịch từ	diamagnetic	diamagnetique
nguồn ion	ion source	source d'ion
nguồn sáng	luminous source	source lumineus
nhóm điểm	point group	groupe de point
nhóm mang màu	chromophore	chromophore
nhóm tăng màu	auxochrome	auxochrome
phá vỡ phân tử, phân mảnh	fragmentation	fragmentation
phân cực kế	polarimeter	polarimètre
phương pháp liên kết hoá trị	valence bond method	méthode de la mésomérie
phương pháp obitan phân tử	molecular orbital method	méthode des obitalé moléculaires
phương pháp phổ cộng hưởng từ hạt nhân	nuclear magnetic resonance spectroscopy	spectrometrie de resonance magnetique nucléaire
phương pháp phổ huỳnh quang	fluorescence spectroscopy	spectrometrie de fluorescene
phương pháp phổ khối lượng	mass spectroscopy	spectrometrie de mass
phương pháp phổ lân quang	phosphorescence spectroscopy	spectrometrie de phosphorescene
phương pháp phổ phát quang hóa học	chemiluminescence spectroscopy	spectrometrie de chimiluminescene
phương pháp phổ Raman	Raman spectroscopy	spectroscopie Raman
phổ	spectrum	spectre
phổ điện tử, phổ electron	electronic spectrum	spectre électronique
phổ dao động quay	rotation-vibrational spectrum	spectre de rotation-vibration
phổ hai chiều	two-demensional spectra	spectre des deux dimensions
phổ hấp thu	absorption spectrum	spectre d'absorption
phổ kế	spectrometer	spectrographe
phổ kế hai chùm tia	double-beam-spectrometer	spectrographe à double faisceau
phổ kế quang học	optical spectrometer	spectromètre optique
phổ lưỡng hướng sắc vòng	circular dichroism spectra	spectre de dichroisme circulaire
phổ quay	rotational spectrum	spectre de rotation

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org

Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú

WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

phổ tán sắc quay	optical rotatory dispersion spectra	spectre de dispersion rotatoire optique
phổ xoá tương tác spin	decoupling spectrum	spectre de découplage
pin (cặp nhiệt điện)	thermocouple	pile thermoélectrique
qui tắc lựa chọn	selection rule	régle de sélection
số hạng	term	terme
số khối	mass number	nombre de mass
số lượng tử	quantum number	nombre quantique
số lượng tử spin	spin quantum number	nombre quantique de spin
số sóng	wave number	nombre d'onde
spin electron	electron spin	spin d'electron
spin hạt nhân	nuclear spin	spin nuclaire
sự hồi phục spin-mạng lưới	spin-lattice relaxation	spin-réseau relaxation
sự hồi phục spin-spin	spin-spin relaxation	relaxation spin-spin
sự hấp thụ	absorption	absorption
sự phân cực quay	rotatory polarization	polarisation rotatoire
sự quay quang học	optical rotatory	rotation optique
sự suy biến	degeneration	dégénérescence
sự tiến động	precession	précession
tác nhân chuyển dịch hóa học	chemical shift reagents	réactif des déplacements chimiques
tâm đối xứng	symmetric center	centre de symétrie
tần số	frequency	fréquence
tần số đặc trưng	characteristic frequence	fréquence caractéristique
thời gian hồi phục spin	relaxation time	temps de relaxation
thuận từ	paramagnetic	paramagnetique
tử ngoại	ultraviolet	ultra-violet
từ trường	magnetic field	champ magnetique
trạng thái cơ bản	ground state	état fondamental
trạng thái kích thích	excited states	état excité
trường bức xạ	radiation field	champ de radiation
trường tứ cực	quadrupole field	champ quadrupole
trường tĩnh điện	electrostatic field	champ électrostatique
trục đối xứng	axis of symmetry	axe de symétrie
vân tay	fingerprinting	dactylogramme
va chạm electron	electron impact	impact d'electrons
vi sóng	microwaves	microondes
yếu tố đối xứng	symmetric element	élément de symétrie

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

ANH -PHÁP-VIỆT

absorption	absorption	sự hấp thụ
absorption cell	cuve	cuvet hấp thụ
absorption spectrum	spectre d'absorption	phổ hấp thụ
asymmetric vibration	vibration asymétrique	dao động bất đối xứng
auxochrome	auxochrome	nhóm tăng màu
axis of symmetry	axe de symétrie	trục đối xứng
bending vibration	vibration de déformation	dao động biến dạng
calibration curve	couee d'étalonnage	đường chuẩn
characteristic frequence	fréquence caractéristique	tần số đặc trưng
chemical ionization	ionisation chimique	ion hoá hóa học
chemical shift	déplacements chimiques	độ chuyển dịch hóa học
chemical shift reagents	réactif des déplacements chimiques	tác nhân chuyển dịch hóa học
chemiluminescence spectroscopy	spectrometrie de chimiluminescene	phương pháp phổ phát quang hóa học
chromophore	chromophore	nhóm mang màu
circular dichroism spectra	spectre de dichroisme circulaire	phổ lưỡng hướng sắc vòng
combination vibration	vibration de combinaison	dao động tổ hợp
complementary colour	couleur complémentaire	màu bổ sung (bổ sắc)
coupling	couplage	ghép
decoupling spectrum	spectre de découplage	phổ xoá tương tác spin
degeneration	dégénérescence	sự suy biến
degree of freedom	degré de liberté	độ tự do
diamagnetic	diamagnetique	nghịch từ
dipole moment	moment dipolair	momen lưỡng cực
double focusing mass spectrometer	spectromètre de mass à double focalisation	khối phổ kế hội tụ kép
double resonance	double résonance	cộng hưởng từ kép
double-beam-spectrometer	spectrographe à double faisceau	phổ kế hai chùm tia
electric field	champ électrique	điện trường
electromagnet	aiment electrique	nam châm điện
electromagnetic field	champ électromagnetique	điện từ trường
electron impact	impact d'electrons	va chạm electron
electron spin	spin d'electron	spin electron
electronic spectrum	spectre électronique	phổ điện tử, phổ electron
electrostatic field	champ électrostatique	trường tĩnh điện
energy levels	niveau d'energie	mức năng lượng
environmental effect	effet des evironments	hiệu ứng môi trường
excited state	état excité	trạng thái kích thích
extinction-coefficient	coefficient d'extinction	hệ số tắt
field ionization	ionisation de champ	ion hoá trường
fine structure	structure fine	cấu trúc tinh tế
fingerprinting	dactylogramme	vân tay
fluorescence spectroscopy	spectrometrie de fluorescene	phương pháp phổ huỳnh quang
force constant	constant de force	hằng số lực
Fourier transform	transform de Fourier	biến đổi Fourier
fragmentation	fragmentation	phá vỡ phân tử, phân mảnh
frequency	fréquence	tần số

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

grating	réseau	cách tử
ground state	état fondamental	trạng thái cơ bản
half band width	demi-largeur de la bande	bề rộng nửa vân sóng
infrared	infrarouge	hồng ngoại
integral curve	courbe d'intégrale	đường cong tích phân
intensity	intensité	cường độ
ion source	source d'ion	nguồn ion
ionization	ionisation	ion hoá
isotop ion	ion isotopique	ion đồng vị
luminous source	source lumineus	nguồn sáng
magnet	aimant	nam châm
magnetic field	champ magnetique	từ trường
mass analyser	analyseur de mass	bộ phận phân tách khối lượng
mass number	nombre de mass	số khối
mass spectroscopy	spectrometrie de mass	phương pháp phổ khối lượng
metastabil ion	ion metastable	ion kém bền
microwaves	microondes	vi sóng
molecular ion	ion moléculaire	ion phân tử
molecular orbital method	méthode des obitalé moléculaires	phương pháp obitan phân tử
moment of inertia (inertia moment)	moment d'inertie	momen quán tính
monochromator	monochromateur	máy (bộ) đơn sắc
near infrared	infrarouge proche	hồng ngoại gần
normal vibration	vibration fondamentale	dao động chuẩn
nuclear magnetic resonance spectroscopy	spectrometrie de resonance magnetique nucléaire	phương pháp phổ cộng hưởng từ hạt nhân
nuclear spin	spin nuclaire	spin hạt nhân
optical density	densité	mật độ quang
optical rotatory	rotation optique	sự quay quang học
optical rotatory dispersion spectra	spectre de dispersion rotatoire optique	phổ tán sắc quay
optical spectrometer	spectromètre optique	phổ kế quang học
oscillator strength	force oscillature	cường độ dao động
overtones (vibration)	harmoniques	dao động điều hoà
paramagnetic	paramagnetique	thuận từ
permanent magnet	aimant permanent	nam châm vĩnh cửu
phosphorescence spectroscopy	spectrometrie de phosphorescene	phương pháp phổ lân quang
photo-multiplier	multiplicateur	ống nhân quang
point group	groupe de point	nhóm điểm
polarimeter	polarimètre	phân cực kế
polarizability	polarisabilité	khả năng phân cực
potantial curve	courbe de potential	đường cong thế
potassium bromide disk	pastille de bromure de potassium	màng kali bromua
precession	précession	sự tiến động
prism	prisme	lăng kính
quadrupole field	champ quadrupole	trường tứ cực
quadrupole mass spectrometer	spectromètre de mass quadripolaire	khối phổ kế tứ cực
quantum number	nombre quantique	số lượng tử
quantum yield	éfficacité de quantum	hiệu suất lượng tử
rac ation field	champ de radiation	trường bức xạ

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 10QB TRẦN HƯNG ĐẠO TP QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Raman spectroscopy	spectroscopie Raman	phương pháp phổ Raman
rearrangement	réarrangements	chuyển vị
receiver	récepteur	bộ phận thu tín hiệu
relaxation time	temps de relaxation	thời gian hồi phục spin
resolving power	pouvoir de résolution	khả năng phân giải
rocking vibration	vibration de balacement	dao động đu đưa
rotational spectrum	spectre de rotation	phổ quay
rotation-vibrational spectrum	spectre de rotation-vibration	phổ dao động quay
rotatory polarization	polarisation rotatoire	sự phân cực quay
sample	échantillon	mẫu
sample inlet system	système d'injection d'échantillon	hệ thống nạp mẫu
scissoring vibration	vibration de ciseau	dao động hình kéo
selection rule	régle de sélection	qui tắc lựa chọn
single focusing mass spectrometer	spectromètre de mass à simple focalisation	khối phổ kế hội tụ đơn
skeletal vibration	vibration de squelette	dao động khung (bộ xương)
slit	fente	khe
spectral slit width	largeur spectrale de la fente	bề rộng khe phổ
spectrometer	spectrographe	phổ kế
spectrum	spectre	phổ
spin quantum number	nombre quantique de spin	số lượng tử spin
spin-lattice relaxation	spin-réseau relaxation	sự hồi phục spin-mạng lưới
spin-spin coupling constant	constante de couplage spin-spin	hằng số tương tác spin-spin
spin-spin relaxation	relaxation spin-spin	sự hồi phục spin-spin
steric hindrance	empêchement stérique	cản trở lập thể
stretching vibration	vibration de valence	dao động hoá trị
superconducting magnet	aiment supraconducteur	nam châm siêu dẫn
symmetric center	centre de symétrie	tâm đối xứng
symmetric element	élément de symétrie	yếu tố đối xứng
symmetric plane	plan de symétrie	mặt phẳng đối xứng
symmetric vibration	vibration symétrique	dao động đối xứng
term	terme	số hạng
thermocouple	pile thermoélectrique	pin (cặp nhiệt điện)
transition moment	moment de transition	momen chuyển
transition probability	probabilité de transition	khả năng chuyển dời
transmittance	transmission	độ truyền qua
twisting vibration	vibration de torsion	dao động xoắn
two-demensional spectra	spectre des deux dimensions	phổ hai chiều
ultraviolet	ultra-violet	tử ngoại
valence bond method	méthode de la mésomérie	phương pháp liên kết hoá trị
visible	visible	khả kiến
wagging vibration	vibration de rotation plane	dao động ve vẩy
wave length	longueur d'onde	chiều dài bước sóng
wave number	nombre d'onde	số sóng

LIÊN ĐOÀN TOÁN - LÍ - HÓA TOOBTRẦN HƯNG ĐẠO TP QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org

Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

absorption	absorption	sự hấp thụ
aimant	magnet	nam châm
aimant permanent	permanent magnet	nam châm vĩnh cửu
aiment electrique	electromagnet	nam châm điện
aiment supraconducteur	superconducting magnet	nam châm siêu dẫn
analyseur de mass	mass analyser	bộ phận phân tách khối lượng
auxochrome	auxochrome	nhóm tăng màu
axe de symétrie	axis of symmetry	trục đối xứng
centre de symétrie	symmetric center	tâm đối xứng
champ de radiation	radiation field	trường bức xạ
champ électrique	electric field	điện trường
champ électromagnetique	electromagnetic field	điện từ trường
champ électrostatique	electrostatic field	trường tĩnh điện
champ magnetique	magnetic field	từ trường
champ quadrupole	quadrupole field	trường tứ cực
chromophore	chromophore	nhóm mang màu
coefficient d'extinction	extinction-coefficient	hệ số tắt
constant de force	force constant	hằng số lực
constante de couplage spin-spin	spin-spin coupling constant	hằng số tương tác spin-spin
couee d'étalonnage	calibration curve	đường chuẩn
couleur complémentaire	complementary colour	màu bổ sung (bổ sắc)
couplage	coupling	ghép
courbe d'intégrale	integral curve	đường cong tích phân
courbe de potential	potantial curve	đường cong thế
cuve d' absirption	absorption cell	cuvet hấp thụ
dactylogramme	fingerprinting	vân tay
échantillon	sample	mẫu
dégénérescence	degeneration	sự suy biến
déplacements chimiques	chemical shift	độ chuyển dịch hóa học
degré de liberté	degree of freedom	độ tự do
demi-largeur de la bande	half band width	bề rộng nửa vân sóng
densité	optical density	mật độ quang
éfficacité de quantum	quantum yield	hiệu suất lượng tử
diamagnetique	diamagnetic	nghịch từ
élémént de symétrie	symmetric element	yếu tố đối xứng
double résonance	double resonance	cộng hưởng từ kép
état excité	excited state	trạng thái kích thích
état fondamental	ground state	trạng thái cơ bản
effet des evironments	environmental effect	hiệu ứng môi trường
empêchement stérique	steric hindrance	cản trở lập thể
fente	slit	khe
force oscillature	oscillator strength	cường độ dao động
fragmentation	fragmentation	phá vỡ phân tử, phân mảnh
fréquence	frequency	tần số
fréquence caractéristique	characteristic frequence	tần số đặc trưng
groupe de point	point group	nhóm điểm
harmoniques	overtones (vibration)	dao động điều hoà
impact d'electrons	electron impact	va chạm electron
infrarouge	infrared	hồng ngoại
infrarouge proche	near infrared	hồng ngoại gần

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÝ - HÓA 000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

intensité	intensity	cường độ
ion isotopique	isotop ion	ion đồng vị
ion metastable	metastabil ion	ion kém bền
ion moléculaire	molecular ion	ion phân tử
ionisation	ionization	ion hoá
ionisation chimique	chemical ionization	ion hoá hóa học
ionisation de champ	field ionization	ion hoá trường
largeur spectrale de la fente	spectral slit width	bề rộng khe phổ
longueur d'onde	wave length	chiều dài bước sóng
méthode de la mésomérie	valence bond method	phương pháp liên kết hoá trị
méthode des obitalé moléculaires	molecular orbital method	phương pháp obitan phân tử
microondes	microwaves	vi sóng
moment d'inertie	moment of inertia (inertia moment)	momen quán tính
moment de transition	transition moment	momen chuyển
moment dipolair	dipole moment	momen lưỡng cực
monochromateur	monochromator	máy (bộ) đơn sắc
multiplicateur	photo-multiplier	ống nhân quang
niveau d'energie	energy levels	mức năng lượng
nombre d'onde	wave number	số sóng
nombre de mass	mass number	số khối
nombre quantique	quantum number	số lượng tử
nombre quantique de spin	spin quantum number	số lượng tử spin
paramagnetique	paramagnetic	thuận từ
pastille de bromure de potassium	potassium bromide disk	màng kali bromua
pile thermoélectrique	thermocouple	pin (cặp nhiệt điện)
plan de symétrie	symmetric plane	mặt phẳng đối xứng
polarimètre	polarimeter	phân cực kế
polarisabilité	polarizability	khả năng phân cực
polarisation rotatoire	rotatory polarization	sự phân cực quay
pouvoir de résolution	resolving power	khả năng phân giải
précession	precession	sự tiến động
prisme	prism	lăng kính
probabilité de transition	transition probability	khả năng chuyển dời
réactif des déplacements chimiques	chemical shift reagents	tác nhân chuyển dịch hóa học
réarrangements	rearrangement	chuyển vị
récepteur	receiver	bộ phận thu tín hiệu
régle de sélection	selection rule	qui tắc lựa chọn
réseau	grating	cách tử
relaxation spin-spin	spin-spin relaxation	sự hồi phục spin-spin
rotation optique	optical rotatory	sự quay quang học
source d'ion	ion source	nguồn ion
source lumineus	luminous source	nguồn sáng
spectre	spectrum	phổ
spectre d'absorption	absorption spectrum	phổ hấp thụ
spectre de découplage	decoupling spectrum	phổ xoá tương tác spin
spectre de dichroisme circulaire	circular dichroism spectra	phổ lưỡng hướng sắc vòng
spectre de dispersion rotatoire optique	optical rotatory dispersion spectra	phổ tán sắc quay
spectre de rotation	rotational spectrum	phổ quay

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP.QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org

Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú

WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

spectre de rotation-vibration	rotation-vibrational spectrum	phổ dao động quay
spectre des deux dimensions	two-demensional spectra	phổ hai chiều
spectre électronique	electronic spectrum	phổ điện tử, phổ electron
spectrographe	spectrometer	phổ kế
spectrographe à double faisceau	double-beam-spectrometer	phổ kế hai chùm tia
spectrometrie de chimiluminescene	chemiluminescence spectroscopy	phương pháp phổ phát quang hóa học
spectrometrie de fluorescene	fluorescence spectroscopy	phương pháp phổ huỳnh quang
spectrometrie de phosphorescene	phosphorescence spectroscopy	phương pháp phổ lân quang
spectrometrie de mass	mass spectroscopy	phương pháp phổ khối lượng
spectrometrie de resonance magnetique nucléaire	nuclear magnetic resonance spectroscopy	phương pháp phổ cộng hưởng từ hạt nhân
spectromètre de mass quadripolaire	quadrupole mass spectrometer	khối phổ kế tứ cực
spectromètre de mass à double focalisation	double focusing mass spectrometer	khối phổ kế hội tụ kép
spectromètre de mass à simple focalisation	single focusing mass spectrometer	khối phổ kế hội tụ đơn
spectromètre optique	optical spectrometer	phổ kế quang học
spectroscopie Raman	Raman spectroscopy	phương pháp phổ Raman
spin d'electron	electron spin	spin electron
spin nuclaire	nuclear spin	spin hạt nhân
spin-réseau relaxation	spin-lattic relaxation	sự hồi phục spin-mạng lưới
structure fine	fine structure	cấu trúc tinh tế
système d'injection d'échantillon	sample inlet system	hệ thống nạp mẫu
temps de relaxation	relaxation time	thời gian hồi phục spin
terme	term	số hạng
transform de Fourier	Fourier transform	biến đổi Fourier
transmission	transmittance	độ truyền qua
ultra-violet	ultraviolet	tử ngoại
vibration asymétrique	asymmetric vibration	dao động bất đối xứng
vibration de balacement	rocking vibration	dao động đu đưa
vibration de ciseau	scissoring vibration	dao động hình kéo
vibration de combinaison	combination vibration	dao động tổ hợp
vibration de déformation	bending vibration	dao động biến dạng
vibration de rotation plane	wagging vibration	dao động ve vẩy
vibration de squelette	skeletal vibration	dao động khung (bộ xương)
vibration de torsion	twisting vibration	dao động xoắn
vibration de valence	stretching vibration	dao động hoá trị
vibration fondamentale	normal vibration	dao động chuẩn
vibration symétrique	symmetric vibration	dao động đối xứng
visible	visible	khả kiến

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÝ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Tài liệu tham khảo

1- J.Brand, G.Eglinton, *Ứng dụng quang phổ trong hóa học hữu cơ*, Nxb. KHKT, Hà nội, 1972.

2- Douglas A.Skoog, James J.Leary, *Principles of Instrumental Analysis*, Sauders College Publishing, 1991.

3- Hobart H.Willard, Lynne L.Merritt Jr., John A.Dean, Frank A.Settle Jr., *Instrumental Methods of Analysis*, Wadsworth Publishing Company, 7th Edition.

4- John R.Dyer, *Application of Absorption Spectroscopy of Organic Compounds*, Prentice-Hall, Inc. Enclewood Cliffs, New York, 1965.

5- Manfred Hess, Herbert Meier, Bernd Zeeh, *Spektroskopische Methoden in der Organischen Chemie*, Georg Thieme Verlag Stuttgart, New York, 1984.

6- Wilhelm Simon, Thomas Clerc, *Structuraufklarung Organischer Verbindungen mit Spektroskopischen Methoden*, Academische Verlaggesellschaft, Leipzig, 1967.

7- Rolf Borsdorf, Manfred Scholz, *Spektroskopische Methoden in der Organischen Chemie*, Academie-Verlag , Berlin, 1968.

8- R.M.Silverstein, G.Clayton Basler, Terence C.Morrill, *Spectrometric Idenfication of Organic Compounds*, John Willey & sons Inc., 1991.

9- Martin Holtzhauer, *Methoden in der Proteinanalytik*, Springer, 1996.

10- Gillman, A.E; Stern, E.S., *Electronic Absorption Spectroscopy*, Arnold, London, 1957.

11- Rao, C.N.R., *Ultraviolet and Visible Spectroscopy*, Butterworth, London, 1961.

12- Nakanishi, K., *Infrared Absorption Spectroscopy*, Hoden Day, San Francisco, 1962.

13- Nakamoto, K., *Infrared Spectra of Inorganic and Coordination Compounds*, Willey, New York, 1963.

14- Colthup, N.B.; Daly, L.H.; Wiberley, S.E., *Introduction to Infrared and Raman Spectroscopy*, 3rd Edition, Academic Press, London, 1990.

15- P.G.Griffiths, *Chemical Infrared Fourier Transform Spectroscopy*, New York, John Wiley & sons, Inc. (1975).

16- A. Abraham, *The Principles of Nuclear Magnetism*, Clarendon Press, Oxford, 1961.

17- D.Chapman, P.D.M.Gnus, *Introduction to Practical High Resolution Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy*, Academic Press, 1966.

18- Adolf Szchunke, *Kernmagnetische Resonanzspektroskopie in der Organischen Chemie*, Academie-Verlag, Berlin, 1977.

19- Frank A.Bovey, *Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy*, Academic Press, 1969.

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP.QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

20- P.S.Pregosin, *Transition Metal Nuclear Magnetic Resonance,* Elsevier, Amsterdam-Oxford-New York-London, 1991.

21- Jan Schraml, Jon M.Bellama, *Two Dimentional NMR Spectroscopy,* John Wiley & sons, 1988.

22- Herbert Budzikiewicz, Carl Djerassi, Dudlev H.Wlliams, *Interpretation of Mass Spectra of Organic Compounds*, Holden-Day, Inc., San Francisco, 1964.

23- Mynard C.Hamming, Norman G.Foster, *Interpretation of Mass Spectra of Organic Compounds*, Academic Press, New York, London, 1972.

24- Д.А.Казицына, Н.Б.Куплетская, *Применение УФ-, ИК-и ЯМР-спектроскопии в органической химии*, Москва, 1971.

25- Б.И.Ионин, Б.А.Ершов, А.И.Кольцов, *ЯМР-спектроскопии в органической химий*, Химия, Москва, 1983.

26- Б.В.Иоффе, Р.Р.Костиков, Б.Б.Разин, *Физические методы определения строения органических молекул*, Ленинград, 1976.

27- Дж.Эмсли, Дж.Финей, Л.Сатклиф, *Спектроскопия ярдерного магнитного резонанса высокого разрешения*, том 1, Изд. "*Мир*", Москва (1968); том 1, Изд. "*Мир*", Москва (1969).

28- Karsten Levsen, *Fundamention Aspects of Mass Spectroscopy*, Verlag Chemie, Weiheim, New York, 1978.

29- James E.Wollrab, *Rotational Spectra and Molecular Structure*, Academic Press, New York and London (1967).

30- J.D.Winefordner, S.G.Shunman, T.C',O'Haver, *Luminescence Spectrometry in Analytical Chemistry*, Wiley Interscience, A Division of John Wiley & Sons, Inc., New York, London, Sydney, Toronto, 1972.

31- Yasuhide Yukawa, *Handbook of Organic Structural Analysis*, W.A.Benjamin, Inc., New York, Amsterdam, 1965.

32- Clifford J.Creswell, Olaf A.Runquist, Malcolm M.Campbell, *Spectral Analysis of Organic Compounds,* Burgess Publishing Company, Second Edition.

33- Donaldl. Pavia, Gary M. Lampman, Georges. Kriz. *Introduction to spectroscopy*. Saunder Golden Sunburst Series. Harcou Brace College Publishers, 1996.

34- R. Kellner, J-M.Meret. M. Otto, H.M.Widmer, *Analytical Chemistry* Wiley - VCH, 1998.

35- Daniel C. Harris, *Quantitative chemical Analysis,* W.H. Freeman and company, New York, 1998.

36- L.D.Rield, S. Sternhell, J.R.Kalman, *Organic Structures from Spectra*. John Wiley & Sons, New York, 1995.

37- Eberhard Breitmaier, *Structure elucidation by NMR in organic Chemistry*. John wiley & sons, New York, 1995.

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP.QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

38- Jeremy K.M.Sanders, Edwin C.Constable, Brian K.Hunter and Clive M.Pearce *Modern NMR spectroscopy*, Oxford University Press, New York, 1995.

39- V.Gottwald *Instrumentell analytisches Praktikum* WCH - Weinheim. New York, 1996.

40- Robert C. Atkins, Francis A. Carey *Organic chemistry* The Mc Graw - Hill companies, INC, New York, 1997.

41- B.H. Bayer, W. Walter. Handbook of organic chemistry Prentice Hall, London, New York, 1996.

42- Pierre Grecias, Jean - Pierre Migeon, Maurice Ravanle, *Chimie Technique et documentation Lavoisier*, Paris, 1992.

43- Russell S. Drabo *Physical Methods in inorganic Chemistry* Reinhold Publishing corporation. Chapman and Hall Ltd, London, 1965.

44- Georbe C. Levy, Gordon L. Nelson *Carbon - 13 Nuclear magnetic Resonance for organic chemists*. Wiley - interscience, a Division of John Willey & sons, inc New York, London, Sydney, Toronto, 1972.

45- Erich kleipeter, Rolf Porsdorf ^{13}C - *NMR Spektroscopie in der organischen Chemie* Akademie Verlag, Berlin, 1979.

46- L.S. Birks *X- Ray spectrochemical Analysic interscience publishers*, New York, 1969.

47- Fabian Gerson *Hight resolusion E.S.R Spectroscopy* John Wiley and sons Ltd. Verlag chemie , 1970.

48- Hans Klausroth, Frendrichkeller, Horst Schneider, *Hochfrequenzspectrokopie in der Polymerforschung*, Akadimie Verlag, Berlin, 1984.

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 10003 TRẦN HƯNG ĐẠO TP QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org

Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú

WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

MỤC LỤC

Chương 1 KHÁI NIỆM VỀ CÁC PHƯƠNG PHÁP PHỔ

1.1. Sự tương tác giữa vật chất và sóng điện từ 4
1.2. Định luật Lambert-Beer 6
1.3. Đường cong hấp thụ và độ phân giải 6
1.4. Vùng phổ quang học 8
1.5. Sơ đồ khối của phổ kế quang học 8

Chương 2 PHƯƠNG PHÁP PHỔ QUAY, PHỔ HỒNG NGOẠI VÀ RAMAN

2.1. Cơ sở lý thuyết 11

2.1.1. Sự xuất hiện của quang phổ quay. 11
2.1.2. Sự xuất hiện của quang phổ dao động 13
2.1.3. Dao động quay của phân tử 16
2.1.4. Hiệu ứng Raman. 17
2.1.5. Dao động riêng của phân tử. 18
2.1.6. Sự liên quan giữa tính đối xứng của phân tử và dao động riêng 20

2.2. Sơ đồ cấu tạo máy và kĩ thuật chụp phổ 21

2.2.1. Phổ kế hồng ngoại 21
2.2.2. Phổ kế Raman lase 26
2.2.3. Phổ kế quay 27

2.3. Sự liên quan giữa tần số hấp thụ và cấu tạo phân tử 28

2.3.1. Các ảnh hưởng làm dịch chuyển tần số đặc trưng 28
2.3.2. Tần số đặc trưng của các nhóm chức hữu cơ 30
2.3.3. Tần số đặc trưng của một số hợp chất vô cơ và phức kim loại 38
2.3.4. Tần số đặc trưng của nhóm chức trong phổ Raman 39

2.4. Ứng dụng phổ hồng ngoại trong phân tích định lượng 41

2.5. Ứng dụng của phổ quay 42

2.5.1. Ứng dụng trong phân tích 42
2.5.2. Xác định khoảng cách nguyên tử 42
2.5.3. Xác định momen lưỡng cực 43

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO, P. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Chương 3 PHƯƠNG PHÁP PHỔ TỬ NGOẠI VÀ KHẢ KIẾN

3.1. Cơ sở lí thuyết 44

3.1.1. Bước chuyển dời năng lượng 44

3.1.2. Sự liên hợp của các nhóm mang mầu 46

3.1.3. Nguyên lý Franck - Condon 48

3.1.4. Các yếu tố ảnh hưởng đến cực đại hấp thụ 50

3.2. Kĩ thuật thực nghiệm 51

3.2.1. Cấu tạo của phổ kế tử ngoại và khả kiến 51

3.2.2. Phổ kế vùng cực tử ngoại 53

3.2.3. Dung môi đo phổ tử ngoại 53

3.2.4. Phương pháp ghi phổ 53

3.3. Phổ tử ngoại và khả kiến của một số hợp chất hữu cơ 53

3.3.1. Hợp chất chứa nhóm mang mầu biệt lập 53

3.3.2. Hợp chất polien 54

3.3.3. Hợp chất cacbonyl α,β-không no C=C-C=O 55

3.3.4. Hệ vòng thơm benzen 57

3.3.5. Hệ dị vòng thơm 62

3.4. Phổ tử ngoại và khả kiến của các chất vô cơ 64

3.5. Ứng dụng của phương pháp phổ tử ngoại và khả kiến 65

Chương 4 PHƯƠNG PHÁP PHỔ CỘNG HƯỞNG TỪ HẠT NHÂN

4.1. Cơ sở vật lí 68

4.1.1. Tính chất từ của hạt nhân 68

4.1.2. Tính chất của hạt nhân từ trong từ trường ngoài 69

4.1.3. Điều kiện cộng hưởng 70

4.1.4. Hiệu ứng hồi phục spin-spin 71

4.2. Phổ kế cộng hưởng từ hạt nhân 72

4.3. Độ chuyển dịch hoá học 73

4.3.1. Định nghĩa 73

4.3.2. Nguyên nhân xuất hiện hằng số chắn 75

4.4. Tương tác spin-spin 79

4.4.1. Hằng số tương tác spin-spin 79

4.4.2. Tương tác spin-spin giữa các proton 80

4.4.2.1. Tương tác geminal 80

4.4.2.2. Tương tác vicinal 80

4.4.2.3. Tương tác spin-spin mạch dài 81

4.4.2.4. Tương tác spin-spin của các proton ở vòng thơm và dị vòng 82

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÝ - HÓA 1000 TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org

Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú

WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

4.5. Cường độ vạch phổ 82

4.6. Phân tích phổ cộng hưởng từ hạt nhân 83

4.6.1. Phân loại phổ 83
4.6.2. Phân tích phổ bậc 1 83
4.6.3. Phổ bậc cao AB và ABX 68

4.7. Phân tích phổ cộng hưởng từ hạt nhân ^{13}C 87

4.7.1. Phổ ^{13}C tương tác ^{1}H 88
4.7.2. Phương pháp phổ ^{13}C xóa tương tác ^{1}H 88
4.7.3. Độ chuyển dịch hoá học 90

4.8. Phổ cộng hưởng từ hạt nhân của một số hạt nhân khác 99

4.8.1. Phổ cộng hưởng từ hạt nhân-photpho-31 (^{31}P-NMR) 99
4.8.2. Phổ cộng hưởng từ hạt nhân -flo-19 (^{19}F-NMR) 100

4.9. Một số phương pháp hỗ trợ phân tích phổ cộng hưởng từ hạt nhân 101

4.9.1. Cộng hưởng từ kép 101
4.9.2. Hiệu ứng NOE 102
4.9.3. Tác nhân chuyển dịch hoá học 103

4.10. Phổ cộng hưởng từ hạt nhân hai chiều 115

4.11. Phương pháp phổ cộng hưởng spin electron 112
4.11.1 Năng lượng cộng hưởng của electron 112
4.11.2. Cấu trúc của phổ ESR 113
4.11.3. Kĩ thuật thực nghiệm 117
4.11.4. Ứng dụng 119
4.11.5. Bài tập ứng dụng 121

Chương 5 PHỔ KHỐI LƯỢNG

5.1. Nguyên tắc chung 124

5.2. Kĩ thuật thực nghiệm 125

5.2.1. Hoá khí mẫu 125
5.2.2. Ion hoá mẫu 126
5.2.3. Tách các ion theo số khối 127
5.2.4. Đêtectơ 130
5.2.5. Ghi nhận tín hiệu 130
5.2.6. Sơ đồ cấu tạo khối phổ kế 131

5.3. Phân loại các ion 132

5.3.1. Ion phân tử 132
5.3.2. Ion đồng vị 132

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

5.3.3. Ion mảnh 133
5.3.4. Ion metastabin 134
5.4. Cơ chế phân mảnh phân tử 134
1- Tách ankyl 134
2- Tách olefin 134
3- Tách allyl 134
4- Tách ion tropylium (vòng thơm) 135
5- Tách đồng li 135
6- Tách dị li 135
7- Tách ở vị trí α đối với nhóm C-Y và C-O 135
8- Tách Retro-Diels-Alder 136
9- Tách phân tử trung hoà bằng chuyển vị liên kết đôi *cis* hay vòng thơm thế *ortho* 136
10- Chuyển vị McLafferty 136
11- Chuyển vị tách gốc 137
5.5. Phổ khối lượng của một số hợp chất 137
1-Ankylbenzen: 137
2- Xeton 138
3- Phenol 139
4- Axit cacboxylic 140
5- Este của axit cacboxylic 140
6- Amin thẳng 141
7-Amin thơm 142
5.6. Một số ví dụ về phương pháp giải phổ khối lượng 143

Chương 6 PHƯƠNG PHÁP PHỔ TIA X

6.1. Cơ sở lí thuyết 150
6.1.1. Nguồn phát tia X 150
6.1.2. Bản chất tia X 151
6.1.3. Sự tương tác của tia X với vật chất 156
6.2. Nguyên lí cấu tạo phổ kế Ronghen 158
6.3. Kỹ thuật đo và phổ nhiễu xạ tia X 161
6.3.1. Phương pháp chụp ảnh Laue 161
6.3.2. Phương pháp đo phổ tia X Bragg 162
6.3.3. Phương pháp đơn tinh thể quay 165
6.3.4. Phương pháp bột 165
6.4. Phương pháp phân tích định tính tia X huỳnh quang 166
6.4.1. Phổ kế tán sắc chiều dài sóng 166

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

6.4.2. Phổ kế tán xạ năng lượng 168
6.5. Các thông số và chỉ số của mặt mạng tinh thể 170

Chương 7 CÁC PHƯƠNG PHÁP KHÁC

7.1. Phương pháp đo độ quay cực 175
7.1.1. Ánh sáng phân cực thẳng 175
7.1.2. Độ quay cực 175
7.1.3. Phương pháp đo góc quay cực 176
7.2. Phổ tán sắc quay và phổ lưỡng hướng sắc tròn 177
7.2.1. Ánh sáng phân cực tròn 177
7.2.2. Phổ tán sắc quay và phổ lưỡng hướng sắc tròn 178
7.2.2.1. Phổ tán sắc quay (ORD) 178
7.2.2.2. Phổ lưỡng hướng sắc tròn 179
7.3. Momen lưỡng cực 181
7.3.1. Khái niệm cơ bản 181
7.3.2. Phương pháp xác định momen lưỡng cực 182
7.4. Phương pháp độ khúc xạ phân tử và độ tán sắc khúc xạ 190
7.4.1. Phương pháp độ khúc xạ phân tử 190
7.4.2. Phương pháp độ tán sắc khúc xạ 195

Chương 8 MỘT SỐ VÍ DỤ KẾT HỢP CÁC PHƯƠNG PHÁP PHỔ GIẢI THÍCH CẤU TẠO HỢP CHẤT HỮU CƠ 200

Chương 9 BÀI TẬP 217

Phụ lục Sự liên quan giữa cấu tạo phân tử và các dữ kiện phổ 266

Bảng 1. Hợp chất loại ankan C-C. 266
Bảng 2. Hợp chất loại anken C=C. 267
Bảng 3. Hợp chất loại ankin C≡C. 269
Bảng 4. Hợp chất loại thơm. 270
Bảng 4a. Phổ hồng ngoại của benzen thế (cm^{-1}) 271
Bảng 5. Hợp chất loại ete C-O-C. 273
Bảng 6. Hợp chất loại ancol, phenol. 274
Bảng 7. Hợp chất loại andehit -CH=O. 275
Bảng 8. Hợp chất loại xeton -C-C(=O)-C-. 277
Bảng 9. Hợp chất loại este, lacton. 279
Bảng 10. Hợp chất loại axit cacboxylic C-COOH. 280
Bảng 11. Hợp chất loại amit, lactam C-C(=O)-N. 281
Bảng 12. Hợp chất loại amin C-N<. 283

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÝ - HÓA 100B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

Bảng 13. Hợp chất chứa -SH, >C=S, -C-S-C- 284
Bảng 14. Hợp chất chứa S, O. 285
Bảng 15. Hợp chất chứa C, P, O, N và halogen. 286
Bảng 16. Hợp chất dị vòng thơm furan, thiophen, pirol, indol. 287
Bảng 17. Hợp chất dị vòng thơm piridin và quinolin. 288
Bảng 18. Bảng tần số đặc trưng nhóm. 290
Bảng 19. Bảng tính hằng số cộng tính Xule đối với các dẫn xuất của metan 313
Bảng 20. Độ chuyển dịch hóa học proton. 313
Bảng 21. Một số đại lượng vật lí quan trọng 319
Các hằng số vật lí 319
Bảng chuyển đổi các hệ số bức xạ điện từ 319
Bảng chuyển đổi các hệ số năng lượng 320
Quan hệ giữa các đơn vị của một số đại lượng vật lí 320
Bảng 22. Bảng chuyển đổi chiều dài bước sóng và số sóng 321
Bảng 23. Giá trị hàm Loren 324

Một số từ Anh - Việt - Pháp thông dụng chuyên ngành 325

Tài liệu tham khảo 335

Mục lục 338

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

NHÀ XUẤT BẢN ĐẠI HỌC QUỐC GIA HÀ NỘI
16 Hàng Chuối - Hai Bà Trưng - Hà Nội
Điện thoại: (04) 9718312; (04) 7547936; Fax: (04) 9714899
E-mail: nxb@vnu.edu.vn

★ ★ ★

Chịu trách nhiệm xuất bản:

Giám đốc: PHÙNG QUỐC BẢO
Tổng biên tập: PHẠM THÀNH HƯNG

Chịu trách nhiệm nội dung:

Hội đồng nghiệm thu giáo trình
Trường ĐHKHTN - Đại học Quốc gia Hà Nội

Người nhận xét: GS. TSKH ĐẶNG NHƯ TẠI
GS. TSKH QUÁCH ĐĂNG TRIỀU

Biên tập: HÀ THỊ ĐIỆP
Biên tập tái bản: ĐINH QUỐC THẮNG
Sửa bài tái bản: HÀ THỊ ĐIỆP
Trình bày bìa: NGUYỄN NGỌC ANH

ĐỘI ĐOÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP. QUY NHƠN

CÁC PHƯƠNG PHÁP VẬT LÝ ỨNG DỤNG TRONG HOÁ HỌC

Mã số: 1K-24 ĐH2006
In 1000 cuốn, khổ 19 x 27 cm tại Nhà in Khoa học và Công nghệ
Số xuất bản: 405 - 2006/CXB/3 - 66/ĐHQGHN, ngày 22/05/2006.
Quyết định xuất bản số: 158 KH/XB
In xong và nộp lưu chiểu quý II năm 2006.

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON

WWW.DAYKEMQUYNHON.UCOZ.COM

DIỄN ĐÀN TOÁN - LÍ - HÓA 1000B TRẦN HƯNG ĐẠO TP.QUY NHƠN

Giá : 35.000đ

https://tieulun.hopto.org
Đóng góp PDF bởi Nguyễn Thanh Tú
WWW.FACEBOOK.COM/DAYKEM.QUYNHON